

THESE

présentée

devant l'UNIVERSITE CLAUDE BERNARD DE LYON

pour obtenir

le grade DE DOCTEUR ES - SCIENCES PHYSIQUES

par

Denis VANDORPE

Ingénieur — I.M.A.G.

Docteur-Ingénieur ès-Sciences

ETUDE MATHEMATIQUE DE LA FABRICATION ET DU
FONCTIONNEMENT DES DISPOSITIFS SEMICONDUCTEURS

Soutenue le 21 Mai 1971

devant la Commission d'Examen

JURY

MM. A. Sarazin Président

L. Néel

J. Kuntzman

F. Robert

} Examineurs

THESE

présentée

devant l'UNIVERSITE CLAUDE BERNARD DE LYON

pour obtenir

le grade DE DOCTEUR ES - SCIENCES PHYSIQUES

par

Denis VANDORPE

Ingénieur I.M.A.G.

Docteur-Ingénieur ès-Sciences

ETUDE MATHEMATIQUE DE LA FABRICATION ET DU
FONCTIONNEMENT DES DISPOSITIFS SEMICONDUCTEURS

Soutenue le 21 Mai 1971

devant la Commission d'Examen

JURY

MM. A. Sarazin Président

L. Néel

J. Kuntzman

F. Robert

} Examineurs



UNIVERSITE CLAUDE BERNARD de LYON

Président :	J. BOIDIN, Professeur
1er Vice-Président :	R. TOURAINÉ, Maître de Conférences agrégé
2ème Vice-Président :	P. PONCET, Maître-Assistant
3ème Vice-Président :	D. SETTELEN, Etudiant

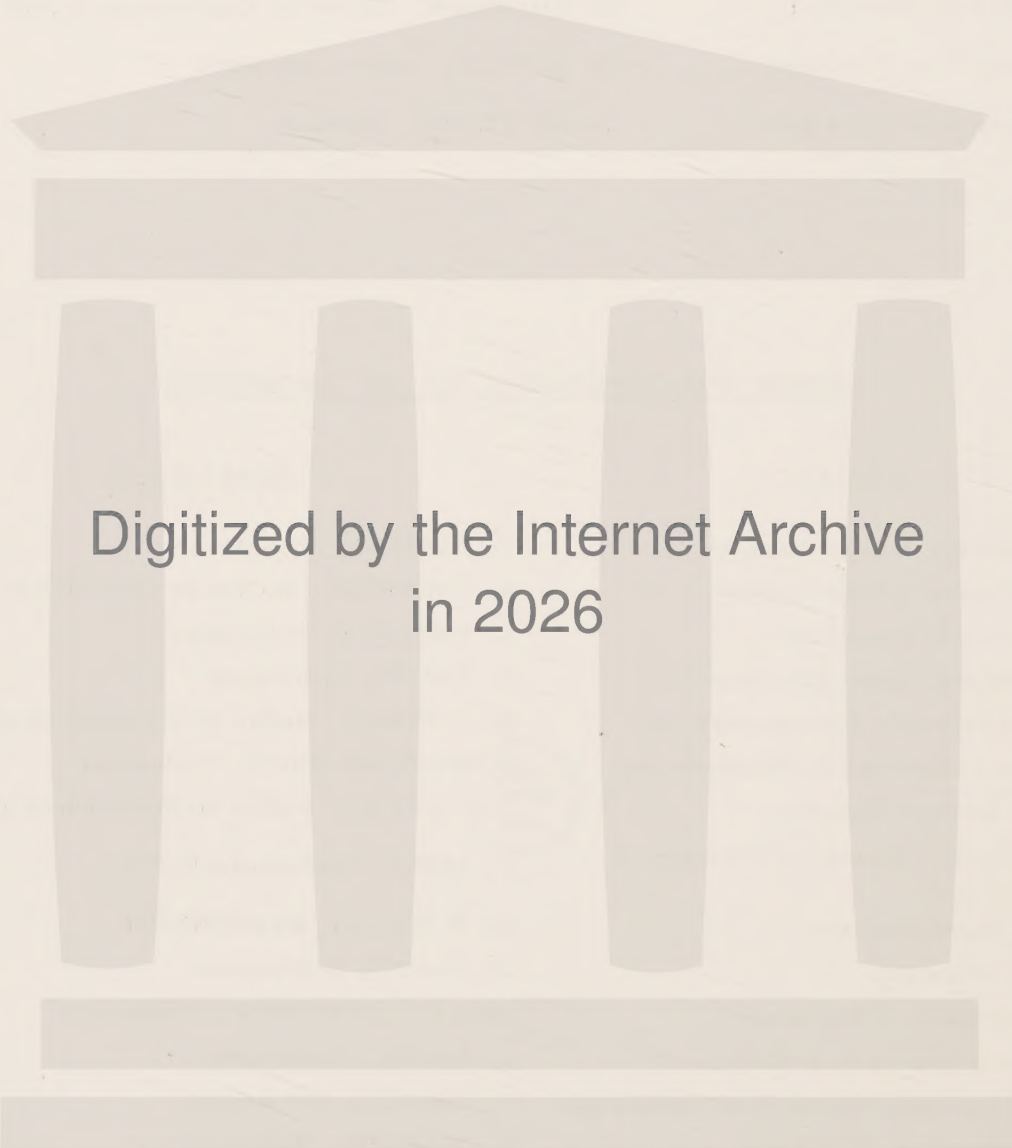
UNITES D'ENSEIGNEMENT ET DE RECHERCHE

Unités

Directeurs

U.E.R. Médicale Grange-Blanche	D. GERMAIN, Professeur
U.E.R. Médicale Alexis-Carrel	R. TOURAINÉ, Maître de Conférences agrégé
U.E.R. Médicale Lyon-Nord	A. BERTOYE, Professeur
U.E.R. Médicale Lyon- Sud-Ouest	L. TOLOT, Professeur
U.E.R. des Sciences Pharmaceutiques	M. CARRAZ, Maître de Conférences agrégé
U.E.R. des Techniques de Réadaptation	P. MOUNIER-KUHN, Professeur
U.E.R. de Biologie Humaine	J.C. CZYBA, Maître de Conférences agrégé
Institut Régional d'Education Physique et Sportive	J. SAPIN, Professeur E.P.S.
U.E.R. de Mathématiques	M. le Doyen J. BRACONNIER
U.E.R. de Physique	M. DUFAY, Professeur
U.E.R. de Chimie et Biochimie	Mlle D. GAUTHERON, Professeur
U.E.R. des Sciences de la Nature	L. DAVID, Professeur
U.E.R. de Biodynamique et Psychopédagogie	J. CHANEL, Professeur
U.E.R. de Physique Nucléaire	A. SARAZIN, Professeur
Institut Universitaire de Technologie-I	L. FEUVRAIS, Professeur
Institut Universitaire de Technologie-II	J. GALLET
Observatoire	J.H. BIGAY, Professeur

Secrétaire Général :	P. IZAUTE
----------------------	-----------



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41552625_0007

AVANT - PROPOS

Qu'il me soit permis d'exprimer ici toute ma reconnaissance à :

Monsieur le Professeur L. NEEL, Membre de l'Académie des Sciences, Président de l'Institut National Polytechnique de Grenoble,

Monsieur le Professeur A. SARAZIN, Président de l'U. E. R. de Physique Nucléaire de l'Université Claude Bernard de Lyon,

Monsieur F. ROBERT, Maître de Conférences à l'Université Claude Bernard de Lyon,

pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de faire partie du jury.

Je tiens à remercier tout particulièrement Monsieur J. KUNTZMANN, Professeur à l'Université Scientifique et Médicale de Grenoble, dont l'aide et les conseils me furent très précieux au cours de cette étude.

Je remercie Monsieur F. MIELLOU, Maître de Conférences à l'Université de Besançon qui a bien voulu s'intéresser aux problèmes mathématiques que je lui ai posés et qui m'a grandement aidé dans la rédaction du premier chapitre.

Je voudrais également remercier Monsieur N. GASTINEL, Professeur à l'Université Scientifique et Médicale de Grenoble, Monsieur J. J. SAMUELI, Chef du Service d'Instrumentation Nucléaire de l'Institut de Physique Nucléaire de Lyon et Monsieur J. LACOUR, Chef du Service de Microélectronique du Laboratoire d'Electronique et de Technologie de l'Informatique de Grenoble pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail ainsi que mes camarades de l'Institut de Physique Nucléaire de Lyon, de l'Institut de Mathématiques Appliquées de Grenoble et du L. E. T. I., dont la collaboration active et amicale a facilité mon travail et plus particulièrement Madame M. STERN, MM. J. BOREL, A. MAFFEI, G. MERCKEL, P. SAINTOT et N. H. XUONG.

Je remercie la D. G. R. S. T. pour l'aide matérielle qu'elle a apportée à la réalisation de cette étude.

Je ne saurais enfin oublier dans mes remerciements, Madame SARAZIN qui s'est chargée de la frappe du manuscrit et le Personnel du Service de Documentation de l'Institut de Physique Nucléaire qui a assuré la réalisation matérielle de cette thèse.

INTRODUCTION

La complexité de plus en plus grande des circuits intégrés a amené les concepteurs de circuits à utiliser de façon courante les outils de la conception assistée par ordinateurs tant pour les problèmes topologiques que pour la simulation des performances du circuit étudié.

En effet il leur est maintenant devenu impossible de simuler leurs réalisations futures en composants discrets, d'une part en raison de l'influence prépondérante que prennent en ce cas les phénomènes parasites (capacités de connexions en particulier), d'autre part en raison de la différence de comportement entre les composants discrets et les transistors réalisés dans un circuit intégré. En outre, le coût de telles études deviendrait rapidement prohibitif.

Cependant pour que la précision d'une simulation sur ordinateur soit bonne, il convient que les "schémas équivalents" des dispositifs actifs soient très précis. C'est ce qui a amené les électroniciens à poser à nouveau le problème des modèles de dispositifs, en raison

- du coût de la simulation,
- de l'impossibilité pour l'ordinateur de déceler les résultats aberrants comme pouvait le faire le concepteur,
- de la très grande précision exigée des résultats eu égard à la rapidité des circuits.

Par ailleurs les schémas équivalents utilisés antérieurement tenaient compte, en général de façon assez grossière, des phénomènes bidimensionnels ou des phénomènes de surface qui, dans le cas des composants discrets, avaient une influence plus faible. Dans le cadre des circuits intégrés par contre, il est indispensable de tenir compte de ces effets qui deviennent parfois prépondérants pour certaines structures (transistors M.O.S., dispositifs très petits ...) ce qui amène à affiner les modèles et à les rendre beaucoup plus complexes.

La réalisation de tels modèles nécessite une connaissance quantitative des phénomènes physiques se produisant dans les dispositifs semi-conducteurs. Malheureusement certains paramètres sont encore très mal connus (mobilités, coefficients d'ionisation ...) et des mesures de tels paramètres sont toujours très délicates.

Par ailleurs on a toujours cherché à relier la technologie et les modèles de composants. Cette recherche amène une solution à ce problème et de plus elle permet

- de comprendre mieux les phénomènes physiques fondamentaux,
- de relier les performances du dispositif à ses caractéristiques technologiques,
- de réaliser un outil d'optimisation des dispositifs.

C'est ce que nous avons essayé de faire dans cette étude en partant des équations de physique fondamentale qui régissent la circulation des porteurs (trous et électrons) dans le milieu cristallin sous certaines hypothèses physiques :

- Semi-conducteur non dégénéré
- Impuretés totalement ionisées
- Température constante dans tout le dispositif.

Partant de bases similaires, GUMMEL ⁽¹⁸⁾ et DE MARI ⁽⁷⁾ ont présenté un modèle unidimensionnel que nous avons repris et étendu à d'autres cas d'étude ⁽⁵⁰⁾. Une première étude bidimensionnelle a été présentée récemment par SLOTBOOM ⁽⁴⁹⁾ dans le cas particulier du transistor bipolaire, faiblement polarisé, en négligeant les effets de surface; ces hypothèses restreignent beaucoup la portée d'une telle étude aussi nous ne les avons pas posées pour notre travail.

Nous complétons le système d'équations aux dérivées partielles écrit avec un ensemble de conditions aux limites caractéristiques du dispositif étudié. Nous avons étudié ensuite (chapitre I) l'existence et l'unicité de la solution du problème posé mais nous n'avons pu conclure cette étude en raison des difficultés présentées par les non-linéarités.

Devant l'impossibilité de réaliser une intégration formelle du système, nous le remplaçons par un problème discret et nous présentons une méthode numérique qui permet de résoudre ce problème discret dans tous les cas, même aux fortes polarisations pour lesquelles on se trouve amené à calculer des exponentielles très grandes (chapitre II).

La méthode évoquée ci-dessus a une convergence relativement lente. Nous avons étudié (chapitre III) divers moyens d'accélération de la convergence, ce qui nous a permis de réduire de moitié environ le temps de calcul nécessaire pour obtenir la solution.

Avec cette méthode nous avons pu calculer pour des transistors M.O.S., bipolaires, ainsi que pour des diodes, les concentrations de porteurs libres, le potentiel électrostatique et les densités de courant en tout point du dispositif, ceci en l'absence de toute hypothèse simplificatrice (excepté celles posées pour écrire le système d'équations et les conditions aux limites). Nous présentons (chapitre IV) quelques exemples de résultats et les comparons avec des analyses physiques des phénomènes, elles-mêmes en bonne concordance avec l'expérience.

Une telle étude cependant restait tributaire des données utilisées dans le calcul. On peut espérer que ce travail permettra de mieux connaître certaines d'entre elles (lois statistiques, mobilité des porteurs dans un champ électrique, ...). Par contre il est indispensable de connaître avec précision le profil de dopage du dispositif. La mesure de tels profils est difficile et relativement imprécise si l'on cherche à connaître le dopage en fonction de la profondeur exclusivement; elle est par contre quasiment impossible si l'on désire un profil bidimensionnel réel.

Devant ces difficultés nous avons été amené à simuler la réalisation technologique des dispositifs ce qui nous a amené à intégrer les équations de diffusion (chapitre V). Une étude physique spécifique permettra de mieux connaître les valeurs des coefficients intervenant dans ces équations et donc de connaître ensuite, à l'aide des programmes écrits, le profil de dopage en fonction uniquement des conditions de fabrication des dispositifs (durée et température des diverses phases de fabrication).

NOTATIONS

2 symboles figurent en général en chaque ligne. Ceci est dû au fait qu'il nous a fallu normaliser les expressions étudiées. Nous donnons donc pour une même grandeur deux symboles :

- 1) un symbole non normalisé
- 2) un symbole normalisé

SYMBOLE		GRANDEUR REPRESENTEE
Non normalisé	Normalisé	
n_i		Concentration d'électrons libres dans le S.C. intrinsèque
x, y	X, Y	Variables géométriques
$n(x, y)$	$N(X, Y)$	Concentration d'électrons libres
$p(x, y)$	$P(X, Y)$	Concentration de trous libres
$\vec{j}_n$	$\vec{J}_n$	Densité de courant d'électrons
$\vec{j}_p$	$\vec{J}_p$	Densité de courant de trous
e	E	Champ électrique
v	ψ	Potentiel électrostatique
k	-	Constante de Boltzmann
T	T	Température absolue
$\rho(x)$	-	Densité de charge d'espace
μ_n	γ_n^{-1}	Mobilité des électrons
μ_p	γ_p^{-1}	Mobilité des trous
d_n	D_n	Constante de diffusion des électrons
d_p	D_p	Constante de diffusion des trous
ϵ	-	Permittivité du matériau
n_d	N_D	Concentration en atomes donneurs
n_a	N_A	Concentration en atomes accepteurs
dop	DOP	Dopage $D\phi P = N_A - N_D$
R	U	Rapport génération recombinaison
τ_p	TAUP	Durée de vie des trous
τ_n	TAUN	Durée de vie des électrons
L_D	-	Longueur de Debye pour le S.C. intrinsèque
q	-	Charge d'un électron
-	D_o	Constante de normalisation

CHAPITRE I

EQUATIONS DE CIRCULATION DES PORTEURSI.1 SYSTEME D'EQUATIONS

L'étude des phénomènes de conduction dans les dispositifs semi-conducteurs, telle que nous l'avons entreprise, résulte de considérations classiques en physique des solides sur la structure cristalline des matériaux semi-conducteurs.

De nombreux ouvrages traitent de ces problèmes (48, 39, 36, 28) et, sur la base des hypothèses de

- non dégénérescence du semi-conducteur
- température constante dans le dispositif
- impuretés totalement ionisées,

on peut écrire le système d'équations

$$\vec{j}_n = q \cdot \mu_n \cdot n \cdot \vec{e} + q \cdot d_n \cdot \vec{\text{grad}}(n) \quad (I.1)$$

$$\vec{j}_p = q \cdot \mu_p \cdot p \cdot \vec{e} - q \cdot d_p \cdot \vec{\text{grad}}(p) \quad (I.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -R - \frac{1}{q} \text{div } \vec{j}_p \quad (I.3)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -R + \frac{1}{q} \text{div } \vec{j}_n$$

$$\text{div}(\vec{e}) = \frac{q}{\epsilon} (n - p + n_a - n_d) \quad (I.5)$$

Le terme R représente le bilan de la génération et de la recombinaison des porteurs. On prendra en général la loi de Hall-Shockley-Read :

$$R = \frac{p \cdot n - n_i^2}{\tau_{p0} (n + n_1) + \tau_{n0} (p + p_1)} \quad (I.6)$$

Toute autre loi pourrait être utilisée à condition bien sûr que l'ordre de grandeur du terme dû à la génération recombinaison soit respecté.

I.2 GENERALITES - JUSTIFICATION DE LA METHODE PROPOSEE

L'intégration de ce système d'équations aux dérivées partielles est impossible à faire d'un point de vue formel. De nombreux auteurs en ont donné une solution unidimensionnelle pour une jonction PN ou pour un transistor bipolaire polarisé en continu, en coupant le dispositif en plusieurs zones dans lesquelles ils faisaient des hypothèses simplificatrices appropriées (12, 23, 21).

Nous avons pour notre part essayé d'éliminer ces hypothèses en cherchant à obtenir une solution approchée à ce problème, en utilisant des techniques d'analyse numérique appropriées.

Nous avons donc entrepris de remplacer le problème différentiel par un problème "discret" en remplaçant les équations différentielles par un ensemble d'équations aux différences finies.

Nous obtenons alors une solution approchée au problème qui, si notre méthode est correcte, tendra vers la solution exacte du problème posé, si celle-ci existe et est unique, quand on fera tendre les valeurs des pas de discrétisation vers zéro.

1.3 NORMALISATION DU SYSTEME

Dans le traitement numérique que nous proposons, il est bien évident que les problèmes de précision de calcul ont une très grande importance. Malheureusement nous savons que, dans les dispositifs étudiés, les concentrations d'électrons et de trous (n et p) ont des variations très importantes (de 10^{21} à 10^{10} atomes par cm^3), il en est de même pour le champ électrique E .

Par ailleurs la forme des équations 1.1, 1.2 et 1.5 est très mal adaptée au calcul. En effet, si l'on évalue les composantes de conduction ou de diffusion, dans la zone de charge d'espace d'une jonction PN par exemple, on trouve des valeurs très nettement supérieures à celles de la densité de courant. Les courants j_n et j_p seraient alors obtenus par la différence de deux termes de grandeur très supérieure.

Il en est de même dans l'équation de Poisson (1.5) dans laquelle nous devons évaluer la charge d'espace comme différence entre la charge libre et la charge liée au réseau cristallin ce qui est assez gênant dans les zones de neutralité électrique.

Nous avons essayé de surmonter ces difficultés en introduisant de nouvelles fonctions qui aient, si possible, des intervalles de variation plus limités et qui nous permettent de remplacer les différences entre termes très grands par des termes équivalents dont le calcul soit plus précis.

En outre, afin d'alléger les écritures, il nous a semblé souhaitable de normaliser le système de façon à n'avoir à étudier que des grandeurs sans dimension.

Nous exprimerons les quantités étudiées en :

- concentrations en unités de n_i
- longueurs en unités de L_D (longueur de Debye)

$$L_D^2 = \frac{\epsilon k T}{2 n_i q^2} \quad (1.7)$$

- densités de courant en J_0 (valeur arbitraire), et nous posons

$$\psi = \frac{q \varphi}{k T}$$

Nous obtenons alors le système d'équations normalisées :

$$\vec{J}_p = -\frac{1}{\gamma_p} \left(\vec{\text{grad}}(P) + P \cdot \vec{\text{grad}}(\psi) \right) \quad (\text{I.8})$$

$$\vec{J}_n = \frac{1}{\gamma_n} \left(\vec{\text{grad}}(N) - N \cdot \vec{\text{grad}}(\psi) \right) \quad (\text{I.9})$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -U - \text{div}(\vec{J}_p) \quad (\text{I.10})$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -U + \text{div}(\vec{J}_n) \quad (\text{I.11})$$

$$\nabla^2 \psi = N - P - \text{DOP} \quad \text{où l'on a} \quad (\text{I.12})$$

$$\text{DOP} = N_D - N_A$$

et U est la valeur, en grandeur normalisée, du bilan génération recombinaison.

1.4 EXISTENCE ET UNICITE DE LA SOLUTION

L'étude unidimensionnelle nous amène à un système d'équations différentielles dont nous préciserons les conditions aux limites ultérieurement.

L'étude bidimensionnelle nous conduira à un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires de type elliptique.

Avant d'utiliser les processus numériques de calcul, il convient de s'assurer de l'existence et de l'unicité de la solution. Nous nous sommes intéressé plus particulièrement dans cette étude aux problèmes posés par le modèle bidimensionnel. Indiquons immédiatement qu'il ne nous a pas été possible de démontrer l'existence ni l'unicité de la solution et que nous avons dû admettre ces deux résultats. Cette hypothèse semble d'ailleurs confirmée par les résultats numériques qui ont été obtenus.

Nous nous efforcerons néanmoins dans ce chapitre de mettre en évidence les difficultés mathématiques de ce problème d'existence de la solution, qui sont importantes et proviennent plus précisément de la présence des termes exponentiels dans les opérateurs.

1.4.1 Système d'équations

Dans le cas de polarisation continue, on peut écrire le système de façon plus classique en posant

$$N = \lambda e^{\psi} \quad (\text{I.13})$$

$$P = \mu e^{-\psi} \quad (\text{I.14})$$

et en considérant par exemple le modèle géométrique de jonction PN (figure I.1) nous pouvons écrire

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^{\psi} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^{\psi} \frac{\partial \lambda}{\partial y} \right) = U \quad (\text{I.15})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\gamma_p} e^{-\psi} \frac{\partial \mu}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\gamma_p} e^{-\psi} \frac{\partial \mu}{\partial y} \right) = U \quad (\text{I.16})$$

Les équations (I.15) et (I.16) sont deux équations elliptiques auto-adjointes

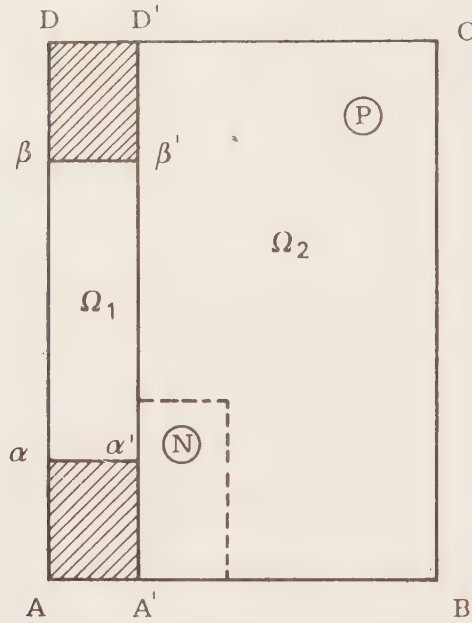


Figure I.1

Modèle géométrique de jonction PN

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \lambda e^{\psi} - \mu e^{-\psi} - DOP \quad (I-17)$$

Nous devons donc résoudre ce système de trois équations sur un domaine de R^2 . Ce domaine sera en général pris rectangulaire et nous préciserons ultérieurement les conditions aux limites sur la frontière; ces conditions seront soit de type Dirichlet soit de type Neumann, mais en général, nous aurons un problème mixte.

Nous pouvons remarquer sur ce système une particularité fort intéressante. En effet si nous supposons connaître la fonction ψ en tout point du domaine Ω et de sa frontière Γ . Les équations (I.15) et (I.16) deviennent alors des équations elliptiques non linéaires en λ et μ , le seul terme de "non linéarité" en λ ou μ étant le terme U . Si en outre on suppose $U \equiv 0$, alors on aura des équations linéaires (cette hypothèse n'est pas trop restrictive comme on le verra ultérieurement).

Par ailleurs si nous supposons connaître λ et μ alors l'équation (I.17) est une équation elliptique non linéaire en ψ .

Cette particularité permet donc de séparer le problème en 3 équations que l'on peut traiter indépendamment et ceci nous suggère immédiatement le type de méthode à utiliser, à savoir une méthode de point fixe de type relaxation qui nous permettra d'utiliser cette simplification importante.

I.4.2 Domaine d'intégration et conditions aux limites

A chacun des dispositifs étudiés, on associe un domaine rectangulaire Ω dans R^2 . Afin de préciser les données du problème nous allons étudier plus particulièrement le cas d'une jonction PN dont nous avons donné la représentation (figure I.1). Les parties hachurées correspondent à l'emplacement du métal.

Soit Ω_1 le rectangle ouvert $\alpha \alpha' \beta \beta'$ qui correspond à la silice
 Ω_2 le rectangle ouvert $A'B C D'$ qui correspond au silicium

on a

$$\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \alpha' \beta'$$

et Γ la frontière de Ω .

On recherche des fonctions

$$\psi(x, y) = \begin{cases} \psi_1(x, y) & (x, y) \in \Omega_1 \\ \psi_2(x, y) & (x, y) \in \Omega_2 \end{cases} \quad (I.18)$$

$\lambda(x, y)$ et $\mu(x, y)$ étant des fonctions définies sur Ω_2 uniquement. (En effet les concentrations de porteurs ne sont pas étudiées dans la silice).

On a les conditions aux limites sur ce cas (cf chapitre II)

$$\frac{\partial \lambda}{\partial x} = 0 \quad (x, y) \in BC \quad (I.19)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial y} = 0 \quad (x, y) \in A'B \text{ ou } D'C \quad (I.20)$$

$$\frac{1}{\gamma_n} \cdot e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial x} = f \quad (x, y) \in \alpha' \beta' \quad (I.21)$$

et de même

$$\frac{\partial \mu}{\partial x} = 0 \quad (x, y) \in BC \quad (I.22)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial y} = 0 \quad (x, y) \in A'B \text{ ou } D'C \quad (I.23)$$

$$\frac{1}{\gamma_p} \cdot e^{-\psi} \frac{\partial \mu}{\partial x} = f(x, y) \quad (x, y) \in \alpha' \beta' \quad (I.21')$$

Les conditions sur les contacts métalliques $A' \alpha'$ et $\beta' D'$ seront pris, dans le calcul numérique, de type Dirichlet pour diminuer le temps de calcul. En toute rigueur, il conviendrait d'écrire des conditions de type Neumann pour tenir compte des phénomènes de recombinaison sur les contacts métalliques. Nous préférons cette formulation dans cette partie de l'étude, ce qui nous donnera l'équation (I.21) pour $x, y \in A'D'$. Les conditions aux limites sur ψ seront prises de type Dirichlet

$$\psi(x, y) = v(x, y) \text{ si } (x, y) \in \Gamma \quad (I.24)$$

En effet ceci est vrai sur les segments $A' \alpha'$, $\alpha' \alpha$, $\alpha \beta$, $\beta \beta'$, $\beta' D'$ et il est très raisonnable d'admettre que l'équilibre thermodynamique est atteint sur les segments $D'C$ et CB . Par contre sur le segment $A'B$, on devrait avoir une condition de type Neumann

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = 0 \quad (I.25)$$

mais on se ramènera à des conditions de type Dirichlet en considérant le domaine complet de la figure I.2 obtenu en ne tenant plus compte de l'axe de symétrie AB . Il est bien évident que si l'on peut montrer l'existence de la solution sur tout le domaine de la figure I.2, elle est démontrée également sur le domaine de la figure I.1.

On admettra que les fonctions γ_n et γ_p sont continues et strictement positives sur $\overline{\Omega_2}$ (adhérence de $\Omega_2 \cup \Omega'_2$ dans R^2) et que les fonctions DOP et U sont des fonctions de $L^2(\Omega_2 \cup \Omega'_2)$ (espace des fonctions de carré sommable sur $\Omega_2 \cup \Omega'_2$).

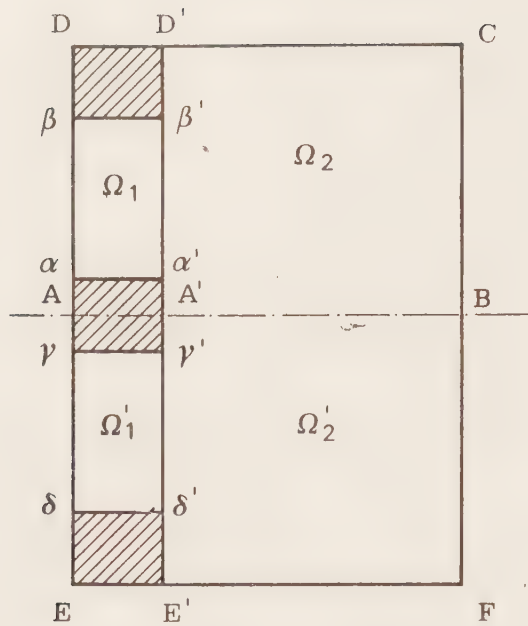


Figure I.2
Modèle complet

I.4.3 Problème en ψ

Nous devons résoudre le problème défini par l'équation (I.17) ou l'équation de Laplace dans la silice avec des conditions de Dirichlet, soit

$$\Delta \psi_1 = 0 \quad (x, y) \in \Omega_1 \cup \Omega'_1 \quad (\text{I.26})$$

$$\Delta \psi_2 - \lambda e^{\psi_2} + \mu e^{-\psi_2} = f(x, y) \quad (x, y) \in \Omega_2 \cup \Omega'_2 \quad (\text{I.27})$$

$$c \cdot \frac{\partial \psi_1}{\partial x} = \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \quad \text{pour } (x, y) \in \alpha' \beta' \cup \gamma' \delta' \quad (\text{I.28})$$

(condition de transmission cf chapitre II)

Nous supposons que λ et μ sont des fonctions données et continues. En outre, de par leur nature physique nous savons qu'elles sont toutes deux strictement positives

$$\lambda(x, y) > 0, \quad \mu(x, y) > 0 \quad (\text{I.29})$$

Nous pouvons ramener ces conditions aux limites à être homogènes, en effet supposons qu'il existe une fonction Φ deux fois continuellement différentiable sur $\overline{\Omega}$ (adhérence de Ω dans $\mathbb{R}^2$) telle que

$$\Phi(x, y) = \psi(x, y) \quad \text{pour } (x, y) \in \Gamma \quad (\text{condition de Dirichlet}) \quad (\text{I.30})$$

posons

$$\overline{\psi} = \psi - \Phi = \begin{cases} \psi_1 - \Phi & (x, y) \in \Omega_1 \cup \Omega'_1 \\ \psi_2 - \Phi & (x, y) \in \Omega_2 \cup \Omega'_2 \end{cases} \quad (\text{I.31})$$

Le système à résoudre devient alors

$$\Delta \overline{\psi}_1 = \Delta \Phi \quad (x, y) \in \Omega_1 \cup \Omega'_1 \quad (\text{I.32})$$

$$\Delta \overline{\psi}_2 - K \lambda e^{\overline{\psi}_2} + K^{-1} \mu e^{-\overline{\psi}_2} = f + \Delta \Phi = F \quad (x, y) \in \Omega_2 \cup \Omega'_2 \quad (\text{I.33})$$

$$c \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x} = \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial x} + (1-c) \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x} \quad (I.34)$$

$$\text{et } \bar{\psi} = 0 \text{ pour } x, y \in I$$

avec dans ces équations

$$K(x, y) = e^{\frac{1}{2}}(x, y) \quad (I.35)$$

Ce problème constitue donc un problème de Dirichlet homogène. On appelle $H^m(\Omega)$ l'espace des fonctions de carré sommable, dont les dérivées, au sens des distributions, sur Ω , jusqu'à l'ordre m sont de carré sommable (m est un entier positif ou nul) et $D(\Omega)$ l'espace des fonctions indéfiniment différentiables, à support compact, dans Ω et on notera $H_0^1(\Omega)$ l'adhérence de $D(\Omega)$ dans $H^1(\Omega)$. ($H_0^1(\Omega)$ est l'espace des fonctions de $H^1(\Omega)$ nulles au bord ⁽²²⁾). On écrira également $L^2(\Omega) = H^0(\Omega)$ espace des fonctions de carré sommable sur (Ω) .

Supposons que le problème de Dirichlet posé admette une solution dans $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ telle que (hypothèse no 1)

$$M(\psi) = \lambda K e^{\psi} - \mu K^{-1} e^{-\psi} \in L^2(\Omega)$$

(pour alléger les notations, on pose $\bar{\psi} = \overline{\psi}$), et soit $\varphi \in D(\Omega)$

Multiplions par $c\varphi$ l'équation (I.32) et par φ l'équation (I.33) et nous intégrons par partie sur le domaine Ω . On a :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_1} c L \bar{\psi}_1 \varphi \, dx \, dy + \int_{\Omega'_1} \Delta \bar{\psi}_2 \varphi \, dx \, dy - \int_{\alpha'\beta'} c \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial x} \varphi \, dy + \int_{\alpha'\beta'} \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial x} \varphi \, dy - \int_{\delta'\gamma'} c \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial x} \varphi \, dy \\ + \int_{\delta'\gamma'} \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial x} \varphi \, dy - \int_{\Omega_2 \cup \Omega'_2} (K \lambda e^{\psi} - K^{-1} \mu e^{-\psi}) \varphi \, dx \, dy = a(\bar{\psi}, \varphi) + (M(\bar{\psi}), \varphi) \end{aligned} \quad (I.36)$$

ou

$$\begin{aligned} a(\bar{\psi}, \varphi) = c \int_{\Omega_1} \left(\frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial y} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) dx \, dy + c \int_{\Omega'_1} \left(\frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial y} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) dx \, dy \\ + \int_{\Omega_2 \cup \Omega'_2} \left(\frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial y} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) dx \, dy \end{aligned} \quad (I.37)$$

et

$$(M(\bar{\psi}), \varphi) = \int_{\Omega_2 \cup \Omega'_2} (K \lambda e^{\psi} - K^{-1} \mu e^{-\psi}) \varphi \, dx \, dy \quad (I.38)$$

ceci en tenant compte du fait que φ est nul sur la frontière Γ . On a donc :

$$\begin{aligned} a(\bar{\psi}, \varphi) + (M(\bar{\psi}), \varphi) = \int_{\Omega_1} \Delta \bar{\psi}_1 \varphi \, dx \, dy + \int_{\Omega'_1} \Delta \bar{\psi}_2 \varphi \, dx \, dy + \int_{\Omega_2 \cup \Omega'_2} F \cdot \varphi \, dx \, dy - \int_{\alpha'\beta'} (1-c) \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x} \cdot \varphi \, dy \\ - \int_{\delta'\gamma'} (1-c) \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x} \cdot \varphi \, dy \end{aligned} \quad (I.39)$$

que nous posons égal à $L(\varphi)$.

Du fait des hypothèses faites sur Φ et f et de l'hypothèse (No 1) faite sur ψ précédemment, les trois fonctionnelles

$$\begin{aligned}\varphi &\rightarrow a(\psi, \varphi) \\ \varphi &\rightarrow \left(M(\psi), \varphi \right) \\ \varphi &\rightarrow L(\varphi)\end{aligned}$$

de $D(\Omega)$ dans R se prolongent par continuité en des fonctionnelles linéaires continues de $H_0^1(\Omega)$ dans R . Ceci nécessitant toutefois pour la fonctionnelle $L(\varphi)$ de vérifier qu'il existe $M > 0$ tel que

$$\left| \int_{\alpha'\beta'} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \varphi \, dy \right| \leq M \left\| \varphi \right\|_{H_0^1(\Omega)} \quad (I-40)$$

quel que soit $\varphi \in H_0^1(\Omega)$, ceci en raison de la présence du terme

$$(1 - c) \int_{\alpha'\beta'} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \cdot \varphi \, dy$$

Une telle démonstration est possible ⁽⁹⁾ et donc $L(\varphi)$ peut être prolongée en une fonctionnelle linéaire continue.

Nous pouvons maintenant écrire le problème variationnel associé au problème posé sous la forme

$$\text{trouver } \psi \in H_0^1(\Omega) \quad \text{tel que } M(\psi) \in L^2(\Omega)$$

et que l'on ait

$$a(\psi, \varphi) + \left(M(\psi), \varphi \right) = L(\varphi) \quad \forall \varphi \in H_0^1(\Omega) \quad (I.41)$$

Si une solution assez régulière de ce problème existe, alors d'après l'intégration par parties écrite ci-dessus (I.36), on voit que ψ est solution du problème.

Il nous a été malheureusement impossible de résoudre le problème défini par (I.41) en raison des non linéarités (exponentielles) que comporte l'opérateur $M(\psi)$.

Pour préciser les difficultés rencontrées dans un tel problème, essayons, en faisant des hypothèses supplémentaires, de poursuivre cette étude.

Posons tout d'abord $c = 1$ (cette simplification est bien sûr abusive et dénature le problème physique posé en imposant aux permittivités de la silice et du silicium d'être égales).

L'opérateur laplacien Δ est un opérateur de graphe monotone maximal dans $L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$ ⁽³⁵⁾, le domaine de Δ étant $H^2(\Omega) \wedge H_0^1(\Omega)$.

Par ailleurs comme les fonctions $\lambda(x, y) \cdot K(x, y)$ et $\mu(x, y) \cdot K^{-1}(x, y)$ sont positives et que e^ψ est fonction croissante de ψ et $e^{-\psi}$ fonction décroissante de ψ , l'opérateur $M(\psi)$ est monotone.

On ne peut cependant pas démontrer que $M(\psi)$ est monotone maximal dans $L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$ (on peut le démontrer seulement pour $\lambda \cdot K$ et $\mu \cdot K^{-1}$ séparément).

Supposons ce résultat vrai. On se trouve alors ramené à un problème de perturbation (ou d'addition) d'opérateurs monotones maximaux.

Il semble impossible de continuer plus loin en ce sens et en particulier on ne peut pas appliquer les résultats de Rockafeller⁽⁴⁴⁾ ni de Brézis - Grondall - Pazy⁽⁴⁾ qui sembleraient les mieux adaptés à ce problème.

Si on admet que λK et μK^{-1} sont tous deux constants et qu'on limite le domaine à $\Omega_2 \cup \Omega'_2$ on peut alors démontrer l'existence de la solution. Ce cas est cependant par trop restrictif et ne correspond à aucune réalité physique.

On aurait pu envisager de transformer le problème posé en une équation intégrale, en utilisant la fonction de Green de l'opérateur Δ et en introduisant des espaces de Orlicz⁽⁴³⁾. Signalons simplement qu'un travail de portée plus générale sur les opérateurs exponentiels est entrepris à la Faculté des Sciences de Besançon en utilisant de telles méthodes.

1.4.4 Problème en λ et μ

Nous supposons que ψ est une fonction continue sur $\overline{\Omega_2}$ (ce qui est nécessairement le cas lorsque ψ est elle-même solution du problème traité précédemment). On a alors

$$\psi = \overline{\psi} + \phi \in H^2(\Omega)$$

et en outre

$$\psi \in C(\overline{\Omega})$$

Les fonctions $\frac{1}{\gamma_n} e^\psi$ et $\frac{1}{\gamma_p} e^{-\psi}$ sont continues et strictement positives sur $\overline{\Omega_2}$.

Nous traiterons uniquement le problème en λ , celui en μ étant similaire.

Multiplions les deux membres de (I.15) par une fonction $\theta \in C^1(\overline{\Omega_2})$ (une fois continûment différentiable sur $\overline{\Omega_2}$). Nous intégrons sur $\overline{\Omega_2}$ et, en employant la formule de Green, on a

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_2} \left[-\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial y} \right) \right] \theta \, dx \, dy &= \int_{\Omega_2} \frac{1}{\gamma_n} e^\psi \left(\frac{\partial \lambda}{\partial x} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \lambda}{\partial y} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) \, dx \, dy \\ &= \int_{\{A'D'\}} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial x} \cdot \theta \right) dy + \int_{\{BC\}} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial x} \cdot \theta \right) dy - \int_{\{A'B\}} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial y} \cdot \theta \right) dx + \int_{\{D'C\}} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial y} \cdot \theta \right) dx \\ &= \int_{\Omega_2} U(x, y) \cdot \theta(x, y) \, dx \, dy \end{aligned} \quad (I-42)$$

En tenant compte des conditions aux limites sur $A'B$ et $D'C$ où $\frac{\partial \lambda}{\partial y} = 0$ et sur BC où $\frac{\partial \lambda}{\partial x} = 0$, on peut écrire en notant

$$B(\lambda, \theta) = \int_{\Omega_2} \left[-\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial y} \right) \right] \theta \, dx \, dy \quad (I.43)$$

$$L(\theta) = \int_{\Omega_2} U(x, y) \cdot \theta(x, y) \, dx \, dy + \int_{\{A'D'\}} f \cdot \theta \, dy \quad (I.44)$$

où f représente la condition de Neumann sur le segment $A'D'$. Le problème variationnel associé au problème en λ est donc

$$B(\lambda, \theta) = L(\theta) \quad \forall (\theta) \in H^1(\Omega_2) \quad (I.45)$$

Supposons que (I.45) admette une solution assez régulière et que $\frac{1}{\gamma_n} e^\psi$ soit continûment différentiable, on a l'existence de la solution d'après la formule de Green écrite précédemment (I.42)

I.4.4.1 Existence de la solution du problème variationnel (I.45)

Comme $\frac{1}{\gamma_n} e^\psi > 0$ sur $\overline{\Omega_2}$ il existe $m > 0$ tel que

$$B(\theta, \theta) \geq m \int_{\Omega_2} \left(\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 \right) dx \, dy \quad \forall \theta \in H^1(\Omega_2) \quad (I.46)$$

Le second membre de cette inégalité n'est pas tout à fait le carré de la norme dans $H^1(\Omega_2)$, il manque en effet un terme de la forme

$$\int_{\Omega_2} \theta^2 \, dx \, dy$$

Soit V_0 le sous espace de dimension 1 engendré par la fonction caractéristique de Ω_2 et

$$V = H^1(\Omega) / V_0$$

On a

$$\|u\|_V = \inf \left\| \tilde{u} \right\|_{H^1(\Omega)} \quad \forall u \in V \quad (I.47)$$

où $u - \tilde{u} = k$, k étant une constante.

Or on a, d'après l'inégalité de Poincaré⁽³³⁾

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq k' \left[\int_{\Omega_2} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right) dx \, dy + \left| \int_{\Omega_2} u \, dx \, dy \right|^2 \right] \quad (I.48)$$

où k' est une constante; d'où, en choisissant $\tilde{u}$ tel que

$$\int_{\Omega_2} \tilde{u} \, dx \, dy = 0, \quad (I.49)$$

on voit que V est un espace de Hilbert pour la norme

$$\left(\int_{\Omega_2} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right] dx \, dy \right)^{1/2}$$

associée au produit scalaire

$$\int_{\Omega_2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right) dx \, dy.$$

D'après l'inégalité (I.46) et l'inégalité

$$B(\lambda, \theta) \leq M \int_{\Omega_2} \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 \right] dx dy \quad \forall \theta \in H^1(\Omega_2) \quad (I.50)$$

on peut écrire que l'on a

$$m \leq \frac{B(u, u)}{\|u\|^2} \leq M \quad \forall u \in V \quad (I.51)$$

c'est-à-dire que $\forall u, v \in V$. $B(u, v)$ est un produit scalaire strictement équivalent au produit scalaire de V . Par ailleurs, supposons que l'on ait

$$\int_{A'D'} f dy = 0 \quad (I.52)$$

(hypothèse physique de conservation du courant). On a alors

$$\int_{\Omega_2} U(x, y) dx dy = 0 \quad (I.53)$$

Supposons que $f \in L^2(\Gamma')$ où Γ' est la frontière de Ω_2 . On peut alors montrer ⁽²²⁾ que l'on a

$$\left| \int_{A'D'} f \cdot \theta dy \right| \leq k''' \|\theta\|_{H^1(\Omega_2)} \quad (I.54)$$

et l'on a, en outre

$$\int_{\Omega_2} U \cdot v dx dy = \int_{\Omega_2} U \cdot k dx dy + \int_{\Omega_2} U \cdot \tilde{v} dx dy \quad (I.55)$$

or

$$\int_{\Omega_2} U dx dy = 0$$

et

$$\left| \int_{\Omega} \tilde{v} dx dy \right| \leq k' \int_{\Omega_2} \left(\left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right) dx dy \quad (I.56)$$

d'après l'inégalité de Poincaré.

$L(\theta)$ est donc une fonctionnelle linéaire continue sur l'espace quotient V . Nous pouvons donc appliquer le théorème de représentation de Riesz ⁽⁴²⁾. Il existe $\lambda \in V$ unique, telle que

$$B(\lambda, u) = L(u) \quad \forall u \in V \quad (I.57)$$

θ définit une classe de solutions définies à une constante près.

On obtiendrait le même résultat pour la formulation variationnelle du problème en μ .

I.4.5 Solution du problème général

L'étude précédente nous montre donc que, pour chacun des problèmes en ψ d'une part, en λ et μ d'autre part, il est raisonnable de supposer qu'il y a une solution et une seule (nous ne l'avons en effet montré que pour un cas particulier pour les problèmes λ et μ). Pour obtenir l'existence et l'unicité de la solution du problème posé, il nous faudrait maintenant démontrer l'existence d'un point fixe d'une application que l'on définirait sur $C^1(\Omega)$ par exemple, en utilisant les applications définies ci-dessus.

Une telle démonstration semble impossible à l'heure actuelle. Nous sommes donc amené à admettre comme hypothèse que la solution du problème posé existe et est unique.

Cette hypothèse semble justifiée par le fait que, dans les calculs numériques que nous avons effectués, nous n'avons pas rencontré de difficultés quant à la convergence du processus.

CHAPITRE II

TRAITEMENT NUMERIQUEII.1 CHOIX DE LA METHODE NUMERIQUE

Conformément à ce que nous avons étudié précédemment, nous remplaçons le système d'équations différentielles par un ensemble d'équations aux différences finies; nous allons maintenant étudier la solution de ce système d'équations. Nous pouvons tout d'abord remarquer que ces équations sont non linéaires. Nous sommes donc contraint à utiliser une méthode indirecte de résolution. Plusieurs types de méthodes seraient utilisables :

- Méthodes de gradient
- Méthodes de point fixe (14, 5, 10).

Nous avons préféré utiliser une méthode de point fixe pour les raisons suivantes:

- Simplicité de mise en oeuvre,
- cette méthode est très bien adaptée aux problèmes de conditions aux limites,
- cette méthode, en ce cas précis, converge assez vite car on connaît une solution grossièrement approchée des phénomènes, alors que les méthodes de gradient, si elles fournissent vite une bonne approximation de la solution, ont en général tendance à être très coûteuses en temps si on souhaite obtenir une précision assez élevée (5, 10, 14, 47).
- Cette méthode nous permet de conserver la simplification importante que nous avons introduite au chapitre I en séparant le système à intégrer en deux sous-systèmes que, dans la méthode du point fixe, nous pouvons résoudre alternativement.

II.2 RAPPELS SUR LA METHODE DU POINT FIXE

La méthode du point fixe est justifiée par les résultats dus principalement à Brouwer, Schauder, Leray et Tychonoff et plus particulièrement le théorème du point fixe de Brouwer qui montre que, dans R^n , si l'on considère une application continue T de la sphère euclidienne $S = \{ \|x\| \leq 1 \}$ dans elle-même, alors il existe un point $y \in S$ tel que $y = T(y)$.

Une fois le problème discrétisé, il sera possible de l'écrire sous forme matricielle $A_e \cdot Y_{e+1} = Z_e$ où A_e et Z_e sont deux matrices fonctions de Y . Nous considérons alors comme application T l'application qui, au e ième itéré fait correspondre le $e+1$ ième et partant d'un vecteur de départ Y_0 nous pouvons, si l'application se révèle contractante, obtenir un vecteur Ω tel que $\Omega = T(\Omega)$, ou pour le moins constater que la suite des vecteurs itérés tend vers une limite Ω' .

Nous avons vu précédemment qu'il est très difficile d'obtenir des résultats théoriques sur ce problème. Nous admettrons donc simplement que la limite que nous avons calculée des vecteurs itérés est la solution du problème discret et qu'elle constitue donc une excellente approximation de la solution réelle du problème posé.

Il est bien évident que, avant de poser cette affirmation, nous avons pris la précaution de vérifier que, d'une part la suite des vecteurs itérés converge effectivement vers une limite et que, d'autre part, cette limite est indépendante du vecteur de départ Y_0 et des valeurs des pas de discrétisation. Pour des valeurs de pas raisonnables, nous avons fait plusieurs essais, sur le même cas d'étude, en multipliant ou en divisant par 2 les valeurs des pas. Les solutions obtenues dans les trois cas différaient de moins de 1% pour les concentrations de l'ordre de 1 à 2% sur la fonction ψ .

II.3 MODELE UNIDIMENSIONNEL

En toute rigueur, il conviendrait de remplacer le système d'équations différentielles par un système d'équations aux différences finies dans l'espace R^3 . Cependant il est bien évident qu'une telle façon de faire est assez irréaliste pour plusieurs raisons :

- nombre de points de discrétisation très élevé, nécessitant une capacité mémoire d'ordinateur énorme,
- temps de calcul, pour chaque itération, très important,
- nombre d'itérations très élevé, comme on peut le prévoir d'après les résultats du modèle bidimensionnel.

En outre ceci n'offrirait pas un avantage énorme sur un modèle bidimensionnel par exemple, dans lequel nous pouvons analyser très précisément les effets de surface "

II.3.1 Equations

Nous avons donc commencé notre étude sur un modèle unidimensionnel, nous limitant par là à l'analyse des phénomènes de volume. Nous sommes en effet contraint, sur un tel modèle, de ne pas tenir compte des phénomènes de surface. En outre, pour les structures réelles, cette façon de faire est nécessairement assez approchée car certains phénomènes sont de nature bidimensionnelle. Ce travail ayant fait l'objet de publications antérieures (50, 51, 53), nous n'en rappellerons ici que le principe général.

En ne considérant qu'une variable géométrique X le système (I.8) à (I.12) peut s'écrire en régime permanent :

$$J_p(X) = - \frac{1}{\gamma_p(X)} \left[\frac{dP(X)}{dX} + P(X) \frac{d\psi(X)}{dX} \right] \quad (II.1)$$

$$J_n(X) = \frac{1}{\gamma_n(X)} \left[\frac{dN(X)}{dX} - N(X) \frac{d\psi(X)}{dX} \right] \quad (II.2)$$

$$\frac{dJ_n(X)}{dX} = U \quad (II.3)$$

$$\frac{dJ_p(X)}{dX} = -U \quad (II.4)$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = N(X) - P(X) - DOP(X) = \lambda e^{\psi} - \mu e^{-\psi} - DOP(X) \quad (II.5)$$

où l'on connaît γ_n , γ_p et DOP .

II.3.2 Conditions aux limites

Sur un tel modèle (Figures II.1 et II.2), nous ne pourrions étudier que la jonction PN et le transistor bipolaire. Pour ces deux dispositifs différeront le mode de traitement et la fonction $DOP(X)$.



Figure II.1 - Modèle unidimensionnel de jonction PN

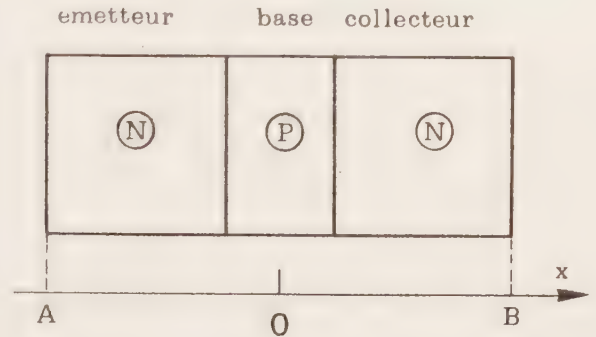


Figure II.2 - Modèle unidimensionnel de transistor NPN

Aux deux limites A et B nous avons supposé, comme il s'agit de contacts métalliques, que les conditions de neutralité électrique sont vérifiées; on a donc

$$N(X) - P(X) = 1 \quad (II.6)$$

$$\rho(X) = 0 \quad (II.7)$$

soit

$$N(X) - P(X) - DOP(X) = 0 \quad (II.8)$$

Ceci revient à supposer une vitesse de recombinaison infinie sur les contacts. On pourrait facilement introduire une vitesse de recombinaison finie.

On ajoutera à ces deux conditions la connaissance des potentiels ψ_A et ψ_B qui sont définis par la polarisation appliquée.

Ces conditions sont suffisantes pour l'étude de la jonction PN, pour le transistor bipolaire il faut tenir compte du contact de base, ce qui est impossible de façon rigoureuse. Nous avons supposé que le courant base est constitué uniquement de porteurs majoritaires dans la base. On pourra alors poser au milieu de la base :

$$\text{Log}(\lambda) = 0 \quad (II.9)$$

$$\text{ou} \quad \text{Log}(\mu) = 0 \quad (II.10)$$

selon le type de transistor considéré. Ceci nous fixe en fait l'origine des potentiels ψ . Le choix du point 0 (figure II.2) n'a pratiquement pas d'influence sur les résultats.

II.3.3 Intégration partielle

Sur ce modèle simple, il est possible d'intégrer analytiquement les équations (II.1) et (II.2) ce qui apporte une simplification importante du processus de calcul. On a en effet

$$\frac{dN(X)}{dX} - N(X) \frac{d\psi(X)}{dX} = \gamma_n(X) J_n(X) = \frac{dN(X)}{dX} + N(X) \cdot E(X) \quad (\text{II.11})$$

que nous intégrons en supposant ψ connu

$$N(X) = e^{-\int E(X) dX} \left[\int \gamma_n(X) J_n(X) e^{\int E(X) dX} + C_n \right] \quad (\text{II.12})$$

et de même

$$\frac{dP(X)}{dX} + P(X) \cdot \frac{d\psi(X)}{dX} = -\gamma_p(X) J_p(X) = \frac{dP(X)}{dX} - P(X) \cdot E(X) \quad (\text{II.13})$$

qui nous donne

$$P(X) = e^{\int E(X) dX} \left[-\int \gamma_p(X) J_p(X) e^{-\int E(X) dX} + C_p \right] \quad (\text{II.14})$$

et comme

$$\int E(X) dX = -\psi(X) \quad (\text{II.15})$$

on a

$$N(X) = e^{\psi(X)} \left[\int \gamma_n(X) J_n(X) e^{-\psi(X)} dX + C_n \right] \quad (\text{II.16})$$

et

$$P(X) = e^{-\psi(X)} \left[-\int \gamma_p(X) J_p(X) e^{\psi(X)} dX + C_p \right] \quad (\text{II.17})$$

Les conditions aux limites en A et B nous permettent de calculer les constantes C_n et C_p et les courants J_n et J_p et l'on a pour une jonction PN par exemple :

$$N(X) = -e^{\psi(X)} \left[\int_X^B \gamma_n(t) J_n(t) e^{-\psi(t)} dt - N(B) e^{-\psi(B)} \right] \quad (\text{II.18})$$

$$P(X) = e^{-\psi(X)} \left[\int_X^B \gamma_p(t) J_p(t) e^{\psi(t)} dt + P(B) e^{\psi(B)} \right] \quad (\text{II.19})$$

$$J_n(X) = \int_A^X U(t) dt + \frac{N(B) e^{-\psi(B)} - N(A) e^{-\psi(A)}}{\int_A^B \gamma_n(t) e^{-\psi(t)} dt} - \frac{\int_A^B \gamma_n(t) e^{-\psi(t)} \cdot \left[\int_A^t U(y) dy \right] dt}{\int_A^B \gamma_n(t) e^{-\psi(t)} dt} \quad (\text{II.20})$$

et une expression analogue pour $J_p(X)$. En reportant ces expressions dans (II.18) et (II.19), on obtient des expressions explicites de N et P. Le gros avantage de ces expressions étant qu'elles sont calculées simplement par des intégrations approchées.

II.3.4 Calcul numérique

D'après la remarque que nous avons faite au chapitre I, le processus de calcul employé a été le suivant :

- 1) Détermination d'une fonction $\psi_0(X)$ de départ.
- 2) Calcul de $N(X)$ et $P(X)$ correspondant à $\psi(X)$; on en déduit λ et μ .
- 3) Calcul de $\psi(X)$ à partir de λ et μ .
- 4) Itération du processus jusqu'à ce que la correction sur $\psi(X)$ soit inférieure à la précision demandée.
- 5) Edition - Résultats.

Nous avons vu, dans les expressions (II.18) et (II.19) donnant N et P , utilisées dans la deuxième partie du calcul, qu'il était nécessaire de calculer des quantités de la forme

$$\int_X^B \gamma_p(t) e^{\psi(t)} dt \quad (\text{II.21})$$

Ces expressions deviennent très rapidement impossibles à calculer quand on désire analyser le fonctionnement des dispositifs pour des polarisations appliquées supérieures à 3 ou 4 volts, auquel cas ψ atteint des valeurs de 120 à 160 et il est impossible de calculer les valeurs de e^{ψ} et $e^{-\psi}$ qu'il nous faut connaître toutes deux.

Nous avons été amené à différencier les cas de traitement selon la forme de la courbe $\psi(X)$ et à introduire des fonctions nouvelles du type

$$F_p(X) = \int_X^B \gamma_p(t) e^{\psi(t) - \psi(X)} dt \quad (\text{II.23})$$

avec lesquelles on réussit à exprimer N et P et qui sont toujours calculables, sous réserve que le pas h de discrétisation soit assez petit.

L'équation de Poisson (II.5) sera intégrée par la méthode de quasi-linéarisation que nous retrouverons pour le modèle bidimensionnel et que nous développerons alors.

Nous avons écrit, à partir de cette méthode, un certain nombre de programmes d'étude pour le transistor bipolaire et la jonction PN. Ces programmes sont relativement peu importants (5 à 600 cartes FORTRAN IV) et d'un emploi aisé. Ils sont d'ailleurs déjà entrés en exploitation courante tant à la C.S.F. qu'au L.E.T.I. où ils sont utilisés pour l'analyse des phénomènes et l'optimisation des dispositifs.

II.4 MODELE BIDIMENSIONNEL

L'analyse unidimensionnelle nous fournit une excellente approximation des phénomènes de volume et les résultats obtenus avec cette analyse se sont révélés en parfaite concordance avec les théories simplifiées les plus évoluées. Cependant un tel modèle est rapidement limité, essentiellement parce que nous y négligeons les effets de surface qui, en certains cas de

polarisation, deviennent prépondérants. En outre dans certains dispositifs tels que le M.O.S.T. les phénomènes sont effectivement de nature bidimensionnelle et il est fort difficile de faire des analyses unidimensionnelles correctes⁽²⁷⁾.

Le système d'équations est alors celui que nous avons écrit au chapitre I (I.15, I.16, I.17) que nous essayons d'intégrer sur un domaine rectangulaire dont la configuration variera selon le dispositif étudié (figures II.3 et II.4).

Il est cette fois impossible de faire la moindre intégration analytique et nous sommes obligé de traiter le problème de façon entièrement discrète.

II.4.1 Conditions aux limites

Nous savons qu'un dispositif semi-conducteur est influencé par le milieu extérieur (photocourants, influence du champ électrique ...); aussi, pour éliminer ces influences, nous avons supposé l'existence d'électrodes de garde en surface, partout où il n'y a pas de contact métallique. En outre de par les processus de fabrication des dispositifs, nous savons qu'il existe toujours en surface une épaisseur de silice. Celle-ci a d'ailleurs parfois un rôle fonctionnel comme dans le M.O.S.T. Aussi nous avons toujours supposé l'existence de cet oxyde protégé par l'électrode de garde, dans tous les dispositifs que nous avons étudiés. Il aurait sans doute été possible de prendre d'autres formulations (nullité de champ normal par exemple) mais ces méthodes auraient été plus restrictives que celle que nous proposons, qui offre en outre l'avantage d'être réalisable technologiquement sur des dispositifs d'essai pour l'analyse quantitative des effets de surface.

Nous avons pensé par contre qu'il était inutile d'essayer de simuler l'influence du caisson d'isolement (technologie planar) d'une part parce que dans une bonne technologie cette influence est toujours négligeable, et d'autre part parce que, comme nous le verrons, cela nous aurait amené à devoir utiliser un nombre beaucoup trop important de points de discrétisation. De toutes façons, si une telle étude s'avérait intéressante, il nous semble évident que le processus de calcul que nous présentons pourra s'appliquer intégralement en modifiant simplement le calcul de la solution initiale et en introduisant bien sûr les fonctions de dopage et de mobilité correspondantes. Nous aurons alors les conditions aux limites :

- sur un contact métallique nous supposerons connaître N , P et ψ conformément à ce que nous avons dit pour le modèle unidimensionnel,
- sur l'électrode de garde nous connaissons le potentiel ψ ,
- sur les limites du dispositif autres que la surface, nous supposerons que les dérivées normales des fonctions ψ , λ , μ sont nulles, ceci impliquant qu'il n'y a pas échange avec l'extérieur.

Cette façon de faire est parfaitement justifiée si nous prenons la précaution de prendre des distances suffisamment grandes pour avoir soit un effet purement unidimensionnel (jonction drain-substrat ou source-substrat pour le transistor M.O.S., centre de la zone active du transistor bipolaire ...) soit une neutralité totale (zone substrat ou zone collecteur).

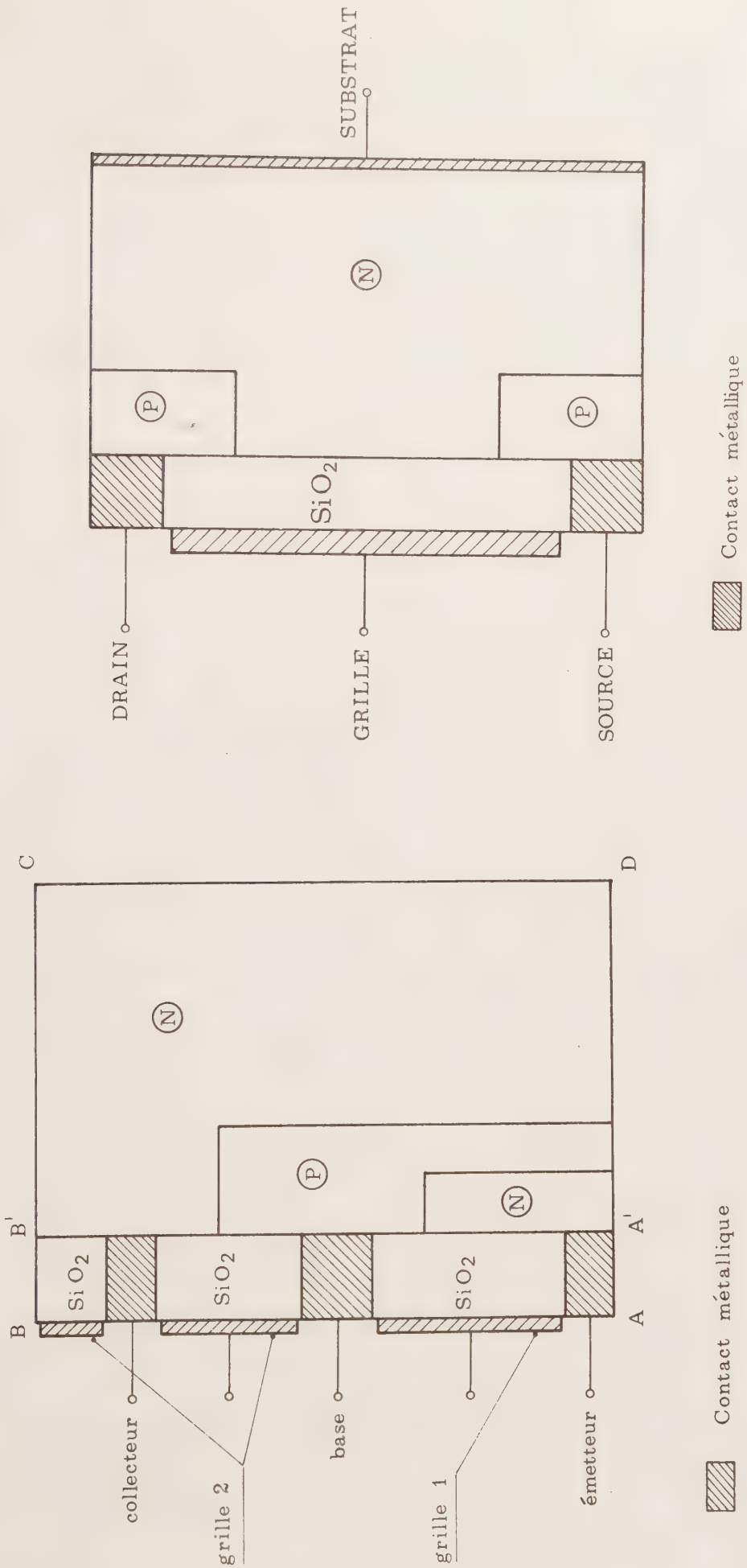


Figure II-3 - Modèle bidimensionnel de transistor bipolaire NPN

Figure II-4 - Modèle bidimensionnel de transistor M. O. S. à canal

II.4.2 Conditions à l'interface Si - Si O₂

De nombreuses théories simplifiées ont été faites (17, 34, 46) sur ce sujet et nous pensons que des programmes tels que ceux que nous avons écrits devraient permettre de mieux connaître les effets dus à la surface. Il ne saurait être question, dans le cadre de ce travail, de comparer les mérites respectifs des diverses études. Nous avons donc utilisé 3 conditions, les plus générales possibles, et nous avons écrit les programmes de telle sorte que les conditions d'interface soient facilement modifiables.

Dans les résultats que nous présenterons, nous avons utilisé les lois suivantes : la composante normale du courant est nulle

$$J_{\text{norm.}} = J_{\text{p norm.}} + J_{\text{n norm.}} = 0 \quad (\text{II.24})$$

$$J_{\text{p norm.}} = U_s = - J_{\text{n norm.}} \quad (\text{II.25})$$

où U_s représente la recombinaison en surface.

Nous avons pris pour notre part

$$U_s = A \cdot (PN - 1) \quad (\text{II.26})$$

cette loi étant une approximation très grossière d'une loi donnée par Grove (17). Nous avons pris cette approximation pour diminuer le plus possible les temps de calcul.

Il existe enfin une loi de discontinuité du champ normal à l'interface, soit

$$\epsilon_{\text{SiO}_2} \cdot E_{\text{SiO}_2} - \epsilon_{\text{Si}} \cdot E_{\text{Si}} = C (\psi_s - \psi_0) \quad (\text{II.27})$$

où C est une constante fonction de la densité des pièges d'interface.

En fait ces lois sont très générales et semblent devoir recouvrir toutes les études classiques. Pour ce qui est du processus mathématique, la seule exigence que nous ayons à formuler est que les trois conditions sur λ , μ et ψ soient des conditions de type Neumann. On pourrait cependant admettre des conditions de type Dirichlet sur λ et μ mais il semble bien que ceci soit irréaliste d'un point de vue physique.

II.4.3 Discretisation - Calcul de λ et μ

Nous remplaçons les équations aux dérivées partielles (I.15, I.16, I.17) par un certain nombre d'équations aux différences. Vu la nature du problème et le fait que dans certaines régions, les fonctions inconnues varient très rapidement dans un intervalle très petit (épaisseur du canal dans un transistor M.O.S., zones de charge d'espace ...) alors que dans d'autres la variation est extrêmement lente (substrat ou collecteur), il est indispensable de prendre un pas de discrétisation variable dans les deux directions X et Y . Cependant, pour obtenir une bonne précision, nous ne pourrions pas utiliser des valeurs de pas variant par trop brutalement et nous devrions donc limiter le rapport de deux pas consécutifs à une valeur comprise entre 0.5 et 2. Par ailleurs, nous avons remarqué que, en certaines régions, ces bornes sont parfois trop élevées et il faut prendre des valeurs plus proches de 1.

En fait, il semble que ces valeurs de pas soient liées essentiellement aux variations de la variable ψ et qu'il faut essayer d'avoir les différences $\Delta\psi$ entre deux points de même ordre de grandeur dans l'ensemble du domaine.

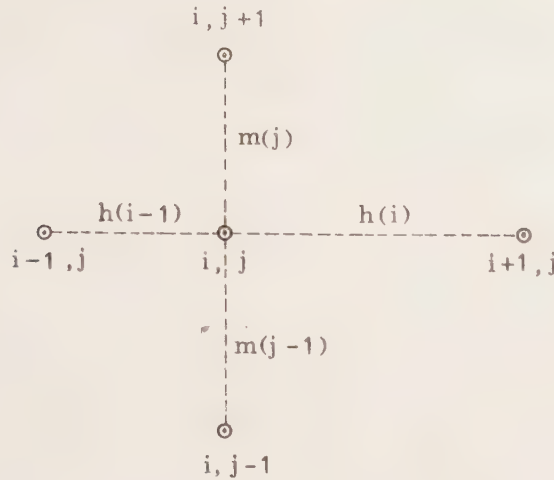


Figure II.5 - Points de discrétisation, notations.

Si nous appelons les valeurs des pas $h(i)$ et $m(j)$ pour le point courant i, j (figure II.5), nous pouvons écrire ⁽⁵⁶⁾, en utilisant la formule de Green pour l'équation (I.15) par exemple

$$\int \int_{r_{ij}} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial y} \right) \right\} dx dy = \int \int_{r_{ij}} U dx dy \quad (\text{II.28})$$

soit, d'après la formule de Green

$$\int \int_{r_{ij}} (S_x - T_y) dx dy = \int_{C_{i,j}} (T dx + S dy)$$

où T et S sont deux fonctions de x et y deux fois dérivables, l'intégrale curviligne étant prise dans le sens positif. Posons

$$S = \frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial x} \quad (\text{II.29})$$

et

$$T = - \frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial y} \quad (\text{II.30})$$

On peut alors écrire

$$\int_{C_{ij}} \left[\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right] dy - \left[\frac{1}{\gamma_n} e^\psi \frac{\partial \lambda}{\partial y} \right] dx = \int \int_{r_{ij}} U dx dy \quad (\text{II.31})$$

et nous évaluons séparément les deux termes de l'égalité. On peut poser, comme les longueurs des pas sont petites :

$$\int \int_{r_{ij}} U dx dy = \frac{[h(i) + h(i-1)][m(j) + m(j-1)]}{4} U_{i,j} \quad (\text{II.32})$$

où $U_{i,j}$ est la valeur de la fonction U au point i, j et l'on a

$$\begin{aligned}
\int_{C_{ij}} \left[\frac{1}{\gamma_n} e^{\psi} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right] dy - \left[\frac{1}{\gamma_n} e^{\psi} \frac{\partial \lambda}{\partial y} \right] dx = \frac{m(j-1)+m(j)}{2} \left[\frac{1}{\gamma_n} e^{\psi_{i+1/2,j}} \frac{\lambda_{i+1,j} - \lambda_{i,j}}{h(i)} \right. \\
\left. + \frac{1}{\gamma_n} e^{\psi_{i-1/2,j}} \frac{\lambda_{i-1,j} - \lambda_{i,j}}{h(i-1)} \right] + \frac{h(i-1)+h(i)}{2} \left[\frac{1}{\gamma_n} e^{\psi_{i,j+1/2}} \frac{\lambda_{i,j+1} - \lambda_{i,j}}{m(j)} + \frac{1}{\gamma_n} e^{\psi_{i,j-1/2}} \cdot \right. \\
\left. \frac{\lambda_{i,j-1} - \lambda_{i,j}}{m(j-1)} \right] \quad (II.33)
\end{aligned}$$

où l'on a par exemple

$$\frac{1}{\gamma_n} e^{\psi_{i-1/2,j}} = \frac{2}{\gamma_n(i,j) + \gamma_n(i-1,j)} e^{\frac{\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{2}} \quad (II.34)$$

Les conditions aux limites de type Neumann seront représentées dans le même formalisme. Nous remplacerons simplement sur la partie du contour C_{ij} la dérivée normale par sa valeur, là où nous la connaissons.

Nous posons, pour alléger l'écriture des expressions

$$h_2(i) = h(i) \cdot [h(i) + h(i-1)] / 2 \quad (II.35)$$

$$h_r(i) = h(i-1) / h(i) \quad (II.36)$$

$$m_2(j) = m(j) \cdot [m(j) + m(j-1)] / 2 \quad (II.37)$$

$$m_r(j) = m(j-1) / m(j) \quad (II.38)$$

On obtient alors un ensemble d'équations du type

$$\begin{aligned}
\lambda_{i+1,j} \left[\frac{h_r(i)}{h_2(i)} \cdot \gamma_n^{-1} e^{\frac{\psi_{i+1,j} + \psi_{i,j}}{2}} \right] + \lambda_{i-1,j} \left[\frac{1}{h_2(i)} \cdot \gamma_n^{-1} e^{\frac{\psi_{i-1,j} + \psi_{i,j}}{2}} \right] \\
+ \lambda_{i,j+1} \left[\frac{m_r(j)}{m_2(j)} \gamma_n^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j}}{2}} \right] + \lambda_{i,j-1} \left[\frac{1}{m_2(j)} \gamma_n^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j-1} + \psi_{i,j}}{2}} \right] \\
- \lambda_{i,j} \left[\frac{1}{h_2(i)} \left(\gamma_n^{-1} e^{\frac{\psi_{i+1,j} + \psi_{i,j}}{2}} \cdot h_r(i) + \gamma_n^{-1} e^{\frac{\psi_{i-1,j} + \psi_{i,j}}{2}} \right) \right. \\
\left. + \frac{1}{m_2(j)} \left(m_r(j) \gamma_n^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j}}{2}} + \gamma_n^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j-1} + \psi_{i,j}}{2}} \right) \right] = U_{i,j} \quad (II.39)
\end{aligned}$$

et un ensemble d'expressions similaires en μ .

Ces deux systèmes sont linéaires en λ et μ à l'expression $U_{i,j}$ près, qui est fonction de λ , μ et ψ . Il serait donc possible d'essayer de les résoudre sous cette forme en supposant connaître $U_{i,j}$ et en itérant jusqu'à ce que la valeur $U_{i,j}$ soit stabilisée et donc que l'on ait la solution du système d'équations.

Cependant, comme pour le modèle unidimensionnel, on voit apparaître dans les équations des termes en e^{ψ} dans les équations donnant λ et des termes en $e^{-\psi}$ dans celles donnant μ . Nous avons vu que pour les valeurs de polarisation appliquée moyennes ou fortes, ψ peut largement dépasser la limite de capacité des ordinateurs en valeur absolue (172 pour l'ordinateur IBM 360-67 que nous avons utilisé) et comme nous devons calculer à la fois e^{ψ} et $e^{-\psi}$, un simple changement d'origine de la fonction ψ ne saurait suffire. Nous allons donc, dans les équations discrétisées de type (II.39), multiplier tous les termes λ ou μ par des quantités

$$e^{\psi} \cdot e^{-\psi} = 1 \quad (\text{II.40})$$

Ceci n'altère évidemment en rien le système d'équations et, en remplaçant les quantités telles λe^{ψ} ou $\mu e^{-\psi}$ par N et P auxquelles elles sont égales, nous obtenons deux nouveaux systèmes d'équations dont N et P seront cette fois les inconnues, soit en regroupant les termes exponentiels

$$\begin{aligned} & N_{i+1,j} \left[\frac{hr(i)}{h2(i)} \gamma_{n \ i+1/2,j}^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{2}} \right] + N_{i-1,j} \left[\frac{1}{h2(i)} \gamma_{n \ i-1/2,j}^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{2}} \right] \\ & + N_{i,j+1} \left[\frac{mr(j)}{m2(j)} \gamma_{n \ i,j+1/2}^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{2}} \right] + N_{i,j-1} \left[\frac{1}{m2(j)} \gamma_{n \ i,j-1/2}^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{2}} \right] \\ & - N_{i,j} \left[\frac{1}{h2(i)} \left(hr(i) \gamma_{n \ i+1/2,j}^{-1} e^{\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{2}} + \gamma_{n \ i-1/2,j}^{-1} e^{\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{2}} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{m2(j)} \left(mr(j) \gamma_{n \ i,j+1/2}^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{2}} + \gamma_{n \ i,j-1/2}^{-1} e^{\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{2}} \right) \right] = U_{i,j} \end{aligned} \quad (\text{II.41})$$

Cette fois tous les termes sont calculables quelle que soit la polarisation appliquée, sous réserve bien sûr, que les pas de discrétisation h et m soient suffisamment petits pour que la variation $\Delta\psi$ soit inférieure à 172, ce qui sera toujours le cas.

II.4.4 Calcul de ψ

L'équation de Poisson (I.17) sera discrétisée comme les équations (I.15) et (I.16) et nous obtenons de même un ensemble d'équations du type

$$\begin{aligned} & \psi_{i+1,j} \cdot \frac{hr(i)}{h2(i)} + \psi_{i-1,j} \cdot \frac{1}{h2(i)} + \psi_{i,j+1} \cdot \frac{mr(j)}{m2(j)} + \psi_{i,j-1} \cdot \frac{1}{m2(j)} - \psi_{i,j} \left[\frac{hr(i)+1}{h2(i)} + \frac{mr(j)+1}{m2(j)} \right] \\ & = \lambda_{i,j} e^{\psi_{i,j}} - \mu_{i,j} e^{-\psi_{i,j}} - DOP_{(i,j)} \end{aligned} \quad (\text{II.42})$$

Ce système d'équations est non linéaire; les termes exponentiels du second membre étant souvent très gênants, nous avons résolu ce problème par une méthode de quasi-linéarisation.

A la $e+1$ ième itération, nous posons :

$$\psi_{i,j}^{(e+1)} = \psi_{i,j}^{(e)} + \alpha_{i,j} \quad (\text{II.43})$$

et nous reportons ceci dans les équations (II.42). En outre, nous remplaçons les termes exponentiels du second membre par un développement limité, on a

$$e^{\psi_{i,j}^{(e+1)}} = e^{\psi_{i,j}^{(e)}} (1 + \alpha_{i,j}) \quad (\text{II.44})$$

$$e^{-\psi_{i,j}^{(e+1)}} = e^{-\psi_{i,j}^{(e)}} (1 - \alpha_{i,j}) \quad (\text{II.45})$$

Nous omettrons l'indice de l'itération e pour alléger l'écriture. On obtient alors un système d'équations en α après avoir reporté tous les termes en ψ dans le second membre et remplacé $\lambda_{i,j} e^{\psi_{i,j}}$ par $N_{i,j}$ ainsi que $\mu_{i,j} e^{-\psi_{i,j}}$ par $P_{i,j}$

$$\begin{aligned} & \alpha_{i+1,j} \cdot \frac{hr(i)}{h2(i)} + \alpha_{i-1,j} \cdot \frac{1}{h2(i)} + \alpha_{i,j+1} \cdot \frac{mr(j)}{m2(j)} + \alpha_{i,j-1} \cdot \frac{1}{m2(j)} - \alpha_{i,j} \left[\frac{hr(i)+1}{h2(i)} + \frac{mr(j)+1}{m2(j)} + N_{i,j} + P_{i,j} \right] \\ & = N_{i,j} - P_{i,j} - \text{DOP}_{i,j} - \psi_{i+1,j} \cdot \frac{hr(i)}{h2(i)} - \psi_{i-1,j} \cdot \frac{1}{h2(i)} - \psi_{i,j+1} \cdot \frac{mr(j)}{m2(j)} - \psi_{i,j-1} \cdot \frac{1}{m2(j)} \\ & \quad + \psi_{i,j} \left[\frac{hr(i)+1}{h2(i)} + \frac{mr(j)+1}{m2(j)} \right] \end{aligned} \quad (\text{II.46})$$

Dans la zone d'oxyde nous avons les mêmes équations en prenant $N = P = \text{DOP} = 0$. Nous avons donc ramené l'étude du problème discret à la recherche de la solution de trois systèmes d'équations linéaires liés du type

$$a_{i,j} \cdot Y_{i+1,j} + b_{i,j} \cdot Y_{i-1,j} + c_{i,j} \cdot Y_{i,j+1} + d_{i,j} \cdot Y_{i,j-1} + e_{i,j} \cdot Y_{i,j} = f_{i,j} \quad (\text{II.47})$$

sachant que pour les inconnues λ et μ les coefficients a, b, c, d, e sont fonctions de ψ , f étant fonction de N, P et ψ , alors que pour l'inconnue ψ les coefficients a, b, c, d sont constants et e, f sont des fonctions de N, P et ψ .

Nous aurons donc l'algorithme général suivant :

- 1) détermination de vecteurs de départ N_0, P_0, ψ_0
- 2) calcul de la correction α sur ψ
- 3) Calcul des corrections β et γ sur N et P
- 4) test d'arrêt et retour éventuel en 2.
- 5) Edition - Résultats

Nous verrons au chapitre suivant comment, selon les cas, nous allons déterminer les trois vecteurs de départ. Nous ferons porter le test d'arrêt sur les valeurs relatives des corrections sur λ et μ et la valeur absolue de la correction sur ψ , et nous arrêtons le calcul si ces corrections deviennent toutes inférieures à la précision demandée. Cette façon de faire ne démontre absolument pas que le processus a convergé (toute série dont le terme général tend vers

zéro n'est pas nécessairement convergente) mais en ce cas nous avons vérifié sur plusieurs exemples que les résultats obtenus sont quasiment indépendants de la valeur de la précision demandée. On peut en déduire raisonnablement qu'il y a effectivement convergence.

II.4.5 Méthodes de résolution des systèmes d'équations posés

II.4.5.1 Existence de la solution à chaque itération

Nous pouvons écrire chacun des trois systèmes posés sous la forme, en numérotant tous les points selon l'ordre naturel

$$A^{(e)} \cdot Y^{e+1} = Z \left(Y^{(e)} \right)$$

où Y et $Z(Y)$ sont des matrices colonnes ayant ℓc lignes si ℓ est le nombre des lignes et c le nombre des colonnes du maillage de discrétisation. A sera une matrice carrée de type $\ell.c.$ Chacune de ces matrices change à chaque itération. Nous ne pourrions mettre en oeuvre la méthode de point fixe que nous avons évoquée que si, quel que soit e , la matrice $A^{(e)}$ est toujours régulière. Il est bien évident qu'il ne saurait être question de calculer à chaque itération le déterminant de cette matrice, pas plus que nous ne pourrions résoudre ces systèmes par des méthodes directes.

Par contre nous pouvons faire, sur la matrice A , un certain nombre de remarques qui nous permettent d'obtenir des résultats partiels. En particulier, nous voyons que tant pour les équations (II.39) que pour les équations (II.46), nous pouvons écrire un système équivalent dont la matrice est réelle et symétrique⁽⁵⁶⁾. En outre, nous savons que les termes diagonaux sont négatifs alors que les termes non diagonaux sont positifs. Comme pour passer des équations (II.39) aux équations que nous traitons numériquement (II.41), nous n'avons fait que des multiplications par 1 pour changer d'inconnues, il est évident que si le système (II.39) a toujours une solution, il en est de même pour (II.41). Nous préférons étudier le système (II.39) en raison de ses propriétés de symétrie que nous perdons dans le système écrit sous la forme (II.41).

Pour l'équation de Poisson la matrice A est à diagonale dominante. On montre aisément que les matrices rencontrées sont irréductibles. On peut donc conclure immédiatement que, quel que soit e , la matrice du système étant irréductible et à diagonale dominante, elle est non singulière.

Nous pouvons conclure de même pour le système tel (II.39) qui nous conduit également à une matrice irréductible. Comme nous avons en certains points des conditions de Dirichlet, nous avons pu également rendre cette matrice à diagonale dominante. Nous sommes donc assurés, au cours des itérations successives, que nous serons amenés à faire, de ne jamais rencontrer de système d'équations qui ne soit pas de Cramer.

II.4.5.1 Méthodes proposées

Dans la discrétisation que nous avons effectuée, nous sommes amenés à utiliser une formule à 5 points. Ceci nous amène à traiter des problèmes matriciels dont les matrices sont tridiagonales par blocs. En fait, tous les éléments de ces matrices sont nuls sauf ceux de

la diagonale principale, de la super-diagonale, de l'infer-diagonale, et ceux de 2 parallèles à la diagonale écartées de c lignes, si nous adoptons la numérotation naturelle pour les points du maillage (figures II.6 et II.7).

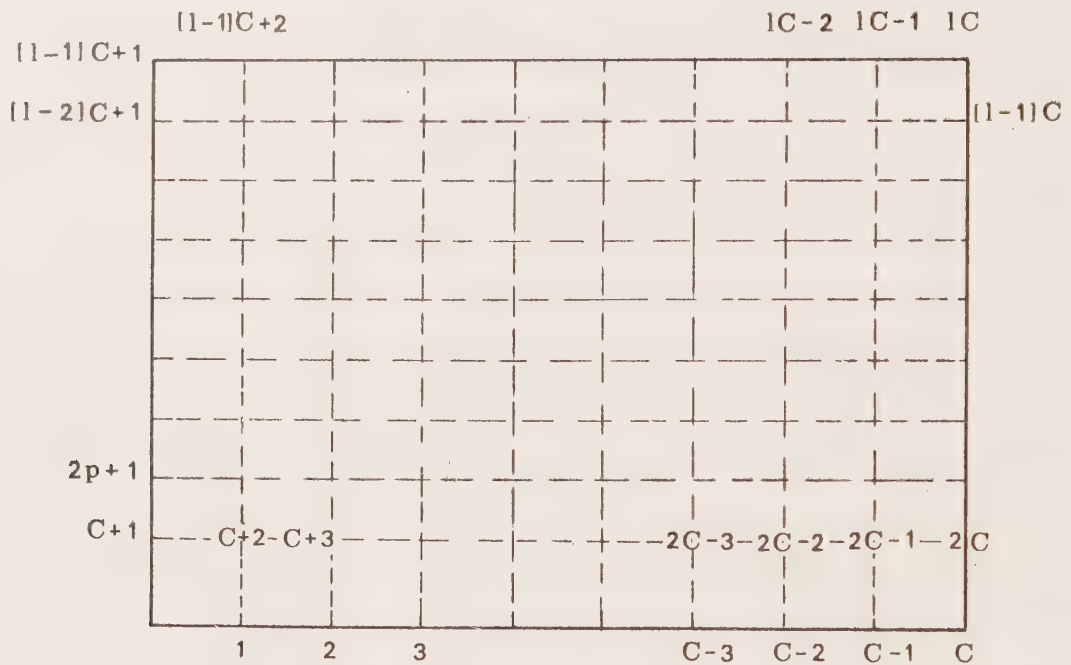


Figure II.6 - Numérotation des points du maillage.

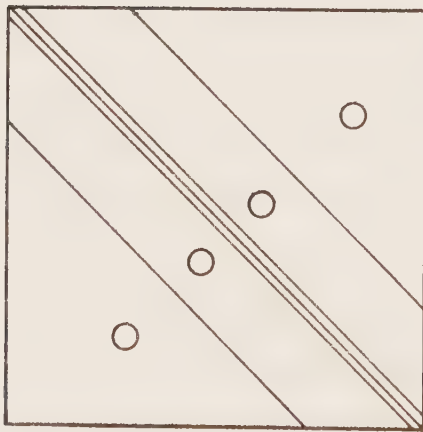


Figure II.7 - Structure de la matrice du système.

Les matrices rencontrées sont des matrices carrées d'ordre $l \cdot c$. De par la taille mémoire disponible sur l'ordinateur utilisé, nous avons été amené à imposer l et c inférieurs à 90 à 100. Ceci nous amène quand même à une matrice d'ordre 10.000. Il est bien évident qu'il ne saurait être question de calculer les solutions à l'aide de méthodes directes. Il serait d'ailleurs impossible de stocker la matrice entière en machine.

Nous avons donc utilisé des méthodes indirectes de résolution. En fait on peut imaginer un grand nombre de variantes diverses à ces méthodes. Nous ne présenterons ici que les trois principales que nous avons utilisées.

II.4.5.1.1 Relaxation par point

Cette méthode, extrêmement classique, est connue sous le nom de "méthode de Gauss-Seidel". Elle consiste à poser, à partir de l'équation (II.47)

$$Y_{i,j} = \frac{1}{e_{i,j}} \left[f_{i,j} - a_{i,j} \cdot Y_{i+1,j} - b_{i,j} \cdot Y_{i-1,j} - c_{i,j} \cdot Y_{i,j+1} - d_{i,j} \cdot Y_{i,j-1} \right] \quad (\text{II.48})$$

et donc à calculer $Y_{i,j}$ à partir des 4 valeurs voisines.

On fera dans cette méthode varier i et j de façon systématique pour, à chaque itération, calculer une fois et une seule la valeur de chaque inconnue $Y_{i,j}$. En fait on fera varier i et j en général en respectant l'ordre naturel de numérotation des points. Cette méthode est extrêmement simple à programmer et converge relativement bien.

Nous pouvons également l'utiliser sous la forme de sur-relaxation par point, en utilisant bien sûr un coefficient de sur-relaxation pour chacune des trois équations à traiter. Nous verrons plus loin les problèmes que pose la détermination de ces coefficients.

II.4.5.1.2 Relaxation par bloc

La forme particulière de la matrice A du système nous a amené à utiliser une méthode de relaxation par lignes (ou par colonnes), qui s'applique parfaitement à ce genre de problème et qui, en général, présente une meilleure contractance que la méthode de relaxation par point. On peut écrire la matrice A sous la forme :

$$A = \begin{bmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & A_\ell & B_\ell \end{bmatrix}$$

où les sous-matrices A_i , B_i , C_i sont carrées d'ordre c , les matrices B_i sont tridiagonales, les matrices A_i et C_i sont diagonales.

Si on partitionnait de même le second nombre et le vecteur inconnu Y dans l'équation $AY = Z$, on pourrait théoriquement utiliser une méthode directe de partitionnement. Une telle méthode est malheureusement impossible à mettre en oeuvre ici, vu la capacité mémoire énorme que cela nécessiterait. Nous préférons donc écrire et traiter successivement les ℓ sous-systèmes de type

$$B_i Y_i = Z_i - A_i Y_{i-1} - C_i Y_{i+1}$$

ou des systèmes de même type dans lesquels on modifiera éventuellement les diagonales des matrices B_i pour se rapprocher de la formulation que nous verrons ultérieurement pour la méthode des directions alternées.

Ceci nous amènera donc à résoudre successivement ℓ systèmes d'équations à c inconnues (ℓ étant le nombre de lignes du maillage de discrétisation). Nous résoudrons ces sous systèmes par une méthode directe car cette fois leur ordre sera assez petit. Nous emploierons pour ce faire une méthode de Gauss appliquée à la matrice tridiagonale B_i .

Cette façon de faire n'entraîne pas beaucoup de calculs supplémentaires (on peut même trouver une forme telle que l'on ait rigoureusement le même nombre de calculs à faire à chaque itération ⁽⁶⁾). Il semble même ⁽¹⁾ que cette méthode diminue l'influence des erreurs d'arrondis dans les calculs.

D'après certaines publications ⁽¹⁹⁾ il serait encore plus intéressant de considérer des "blocs" plus importants que la ligne ou la colonne. Nous n'avons pas essayé d'employer une telle technique car en ce cas on perd l'avantage de la simplicité de la matrice tridiagonale du système B_i . Il serait intéressant de programmer une telle variante en laissant arbitraire le choix de la taille du bloc de façon à réduire la durée du calcul. Pour cette méthode de relaxation par bloc, nous avons également utilisé la technique de sur-relaxation.

II.4.5.1.3 Méthode des directions alternées (ou de Peaceman-Rachford)

Cette méthode est assez récente. Elle a été introduite par Peaceman, Rachford et Douglas ^(38, 9) dans l'étude du problème de Dirichlet. Elle a été ensuite étendue pour l'étude des équations elliptiques quel que soit le domaine utilisé et avec des conditions aux limites mixtes.

Dans cette méthode, nous écrirons la matrice A sous la forme :

$$A = H + V + \Sigma \quad (\text{II.49})$$

où H est une matrice tridiagonale contenant les termes provenant de la discrétisation de $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$. V est une matrice dont la diagonale principale et deux parallèles à celle-ci sont non nulles (les termes la composant proviennent de la discrétisation de $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$) et la matrice Σ est une matrice diagonale. Ces matrices sont toutes réelles et d'ordre $l.c.$ Les matrices H et V sont toutes deux à diagonale dominante.

On peut donc ramener ce problème à un ensemble de deux systèmes d'équations, soit :

$$(H + \frac{1}{2} \Sigma + rI) Y = (rI - V - \frac{1}{2} \Sigma) Y + Z \quad (\text{II.50})$$

$$(V + \frac{1}{2} \Sigma + rI) Y = (rI - H - \frac{1}{2} \Sigma) Y + Z \quad (\text{II.51})$$

quel que soit le scalaire r . En posant :

$$H_1 = H + \frac{1}{2} \Sigma, \quad V_1 = V + \frac{1}{2} \Sigma \quad (\text{II.52})$$

on a alors en notant e le No de l'itération :

$$(H_1 + r_{e+1} I) Y^{(e+1/2)} = (r_{e+1} I - V_1) Y^{(e)} + Z \quad (\text{II.53})$$

$$(V_1 + r_{e+1} I) Y^{e+1} = (r_{e+1} I - H_1) Y^{e+1/2} + Z \quad (\text{II.54})$$

les scalaires r_e étant des paramètres d'accélération qu'il nous faudra également déterminer.

Les matrices que l'on rencontre dans ce processus $H_1 + r_{e+1} I$ et $V_1 + r_{e+1} I$ sont tridiagonales (ou peuvent se ramener à des matrices tridiagonales en modifiant la permutation des indices).

Il est facile de voir que, en introduisant le même découpage en lignes ou colonnes que dans la méthode de relaxation par bloc, on peut ramener la recherche de la solution des équations (II.53) et (II.54) à celle de ℓ ou c sous-systèmes d'équations qui sont tous tri-diagonaux. Comme on l'a fait pour la méthode de relaxation par bloc, on résoudra ces petits systèmes par la méthode de Gauss.

L'application de la méthode de Peaceman-Rachford présente quelques difficultés pour l'étude de l'équation de Poisson en raison de la présence de la colonne d'interface entre le silicium et la silice pour laquelle la partie des matrices V et Σ correspondantes peut devenir particulière. On remplacera en ce cas, pour le sous-ensemble des composantes du vecteur, l'équation (II.54) par l'équation

$$Y^{e+1} = Y^{e+1/2} \quad (\text{II.55})$$

On peut alors appliquer l'algorithme de Peaceman-Rachford ou l'une quelconque de ses variantes (56).

II.4.6 Algorithmes

L'algorithme général est bien sûr identique à celui donné pour le modèle unidimensionnel :

- 1) Initialisation
- 2) Calcul de ψ
- 3) Calcul de N et P
- 4) Test convergence et retour éventuel en 2
- 5) Editions résultats.

En fait, il nous faut maintenant préciser les différentes phases de ce calcul et surtout indiquer les diverses variantes que nous avons utilisées et leurs avantages et inconvénients respectifs.

Nous verrons au chapitre suivant les problèmes posés par l'initialisation et les méthodes que nous avons utilisées. En fait le rôle de cette partie est de générer la solution Y_0 , la plus réaliste possible.

La suite du calcul va consister à définir l'application $Y_{e+1} = T(Y_e)$. En fait, le vecteur Y_e se compose de trois sous-vecteurs ψ_e , N_e et P_e ou, ce qui revient au même, ψ_e , λ_e , μ_e . De nombreuses possibilités existent, dans le cadre général que nous nous sommes fixé, pour définir l'application T . Tout dépendra de la stratégie que l'on va utiliser pour conduire nos calculs. Il en existe deux principales :

II.4.6.1 Solution globale

Nous avons vu que l'on calcule les solutions des systèmes en ψ , λ et μ par des méthodes indirectes. Ceci revient donc à dire que, à chaque itération complète e , on va devoir, sur chacune des trois équations, effectuer un certain nombre d'itérations partielles ; soit m l'indice par lequel on les repérera (ceci quelle que soit la méthode de résolution retenue). La solution globale consistera à mener la méthode indirecte à son terme sur chacune des équations et donc, par exemple, ψ_{e+1} sera la solution effective de l'ensemble des équations (II.46).

Ceci nécessitera m_1 itérations partielles. Ensuite, quand nous nous intéresserons aux inconnues λ et μ , nous adopterons la même stratégie et nous prendrons donc λ_{e+1} et μ_{e+1} comme solutions effectives du système d'équations dans tout le domaine. Ceci nécessitera m_2 itérations partielles. Nous avons appelé cette stratégie la méthode globale.

II.4.6.2 Solution locale

A l'opposé de la méthode globale, on peut être tenté de ne faire qu'une itération partielle sur chacune des équations donnant ψ , λ et μ . En ce cas, ψ_{e+1} par exemple, n'est pas la solution du système d'équations, écrit dans tout le domaine. Nous avons appelé une telle solution la méthode locale (ceci pour rappeler que ψ , λ et μ ne sont solutions de l'équation que localement ou, plus précisément, que les résidus associés à ψ_e , λ_e et μ_e ne sont nuls que localement). Il est bien évident que toute solution intermédiaire entre la méthode globale et la méthode locale serait envisageable et que, par exemple, on pourrait décider de faire m_1 itérations partielles sur l'équation de Poisson, puis m_2 itérations partielles sur les équations en λ et μ . Nous pouvons même faire varier m_1 et m_2 au cours du calcul.

II.4.6.3 Comparaison entre les méthodes

Nous verrons au chapitre suivant les problèmes théoriques posés par une telle comparaison et les difficultés liées au choix d'une méthode optimale. Le choix entre la méthode globale et une méthode locale sera l'un des paramètres sur lesquels nous pourrions agir pour réduire au maximum le temps de calcul d'une solution. En fait ce choix n'est pas simple, compte tenu par ailleurs des divers autres paramètres qui interviennent dans la durée du calcul.

A titre indicatif, nous n'avons jamais dû faire plus de 5 à 6 itérations complètes pour la méthode globale mais il nous était souvent nécessaire de faire de 10 à 70 itérations partielles sur chacune des équations. Par contre, en utilisant une méthode locale avec $m_1 = m_2 = 1$, il nous est arrivé de faire plus de 300 itérations partielles (ces chiffres ont été observés pour un transistor bipolaire fortement polarisé, la méthode de résolution étant L.S.O. R.). Il semble qu'il soit préférable au départ d'utiliser une méthode locale avec $m_1 = m_2 = 1$ et de faire croître m_1 et m_2 au fur et à mesure que le vecteur itéré Y_e se rapproche de la solution Ω pour finir avec la méthode globale. Nous avons pu ainsi réduire le nombre d'itérations partielles à 150 - 200 dans le cas évoqué précédemment. Il est malheureusement impossible d'obtenir une loi théorique de variation de m_1 et m_2 et les utilisateurs éventuels de ces programmes devront acquérir une certaine expérience pratique pour faire varier m_1 et m_2 de la façon la plus efficace possible.

II.4.7 Calcul des courants

Connaissant les concentrations de porteurs et le potentiel électrostatique, il est théoriquement possible de calculer la densité de courant en tout point. On a par exemple, pour le courant de trous

$$\vec{J}_p = -\frac{1}{q_p} \left[\vec{\text{grad}}(P) + P \vec{\text{grad}}(\psi) \right] \quad (\text{II.56})$$

Cependant ceci nécessiterait de calculer numériquement les dérivées de P et ψ et ensuite de les reporter dans l'équation (II.56). Cette façon de faire est absolument irréaliste car on pourrait commettre des erreurs de calcul de l'ordre de grandeur du courant lui-même (le calcul numérique des dérivées est en effet très imprécis et on multiplie ensuite l'erreur commise par des quantités très grandes).

On pourrait également évaluer les expressions du type $\vec{\text{grad}}(\lambda)$ ou $\vec{\text{grad}}(\mu)$.

On a en effet

$$\vec{J}_p = -\frac{1}{\gamma_p} e^{-\psi} \vec{\text{grad}}(\lambda) \quad (\text{II.57})$$

mais ceci ne serait possible que pour les faibles valeurs de polarisation (pour pouvoir calculer μ) et entraînerait la même imprécision que la méthode précédente.

Pour obtenir une meilleure précision de calcul, on peut remplacer les fonctions λ , μ (ou N et P) et ψ par des fonctions de lissage (type "spline" fonction par exemple) qui permettent d'évaluer les dérivées avec une meilleure précision. Cette façon de faire donne de meilleurs résultats mais de toute façon la précision reste assez faible; nettement moins bonne en tous cas que sur les inconnues principales N , P , ψ .

On préférera intégrer l'équation (II.56). On a en effet si on appelle X_p et Y_p les composantes en X et Y du vecteur courant J_p :

$$\text{Div}(\vec{J}_p) = -U = \frac{\partial X_p}{\partial X} + \frac{\partial Y_p}{\partial Y} \quad (\text{II.58})$$

que l'on peut écrire par exemple :

$$\frac{\partial X_p}{\partial X} = -R - \frac{\partial Y_p}{\partial Y} = -R' \quad (\text{II.59})$$

On peut alors intégrer l'équation (II.56) en X comme on l'a fait pour le modèle unidimensionnel, ce qui donne, quelle que soit la valeur de Y :

$$P(X) = -e^{\int E dx} \left[\int \gamma_p X_p e^{-\int E dx} + C_p \right] \quad (\text{II.60})$$

et si l'on appelle A et B les limites des valeurs de X pour l'origine et l'extrémité de l'intervalle d'intégration, on a :

$$C_p = -P(A) e^{\psi(A)} \quad (\text{II.61})$$

$$P(B) = -e^{-\psi(B)} \left(\int_A^B \gamma_p K_p e^{\psi(t)} dt \right) \quad (\text{II.62})$$

$$- \int_A^B \gamma_p \left[\int_A^t U(v) dv \right] e^{\psi(t)} dt \right) + P(A) e^{\psi(A) - \psi(B)}$$

en tenant compte de l'intégration de (II.59) en

$$X_p(X) = K_p - \int_A^X R'(t) dt \quad (\text{II.63})$$

De la connaissance de $P(B)$ et $P(A)$ on peut tirer K_p , soit

$$K_p = \frac{P(A) e^{\psi(A)} - P(B) e^{\psi(B)} + \int_A^B \gamma_p \left[\int_A^v R'(t) dt \right] e^{\psi(v)} dv}{\int_A^B \gamma_p e^{\psi(t)} dt} \quad (II.64)$$

et on tirerait des expressions similaires en faisant l'intégration en Y , soit

$$\frac{\partial Y_p}{\partial Y} = -R'' = -R - \frac{\partial X_p}{\partial X} \quad (II.65)$$

$$Y_p(Y) = K'_p - \int_{A'}^Y R''(t) dt \quad (II.66)$$

où on notera A' et B' les limites de l'intégration en Y .

On peut par ce processus calculer le courant. En effet pour connaître K_p et K'_p , il suffit de savoir calculer R' et R'' que l'on pourra évaluer en prenant un processus itératif où l'on calcule alternativement X_p et Y_p .

Ce processus est relativement complexe et on peut le simplifier notablement en remarquant que, d'après les conditions aux limites, on peut connaître K'_p . En effet on a écrit que pour $Y = 0$, la composante Y_p du courant est nulle quel que soit X . On a donc :

$$K'_p = 0 \quad (II.67)$$

soit donc :

$$K'_p = 0 = \frac{P(0) e^{\psi(0)} - P(Y) e^{\psi(Y)} + \int_0^Y \gamma_p \left[\int_0^v R''(t) dt \right] e^{\psi(v)} dv}{\int_A^Y \gamma_p e^{\psi(t)} dt} \quad (II.68)$$

La relation (II.68) est valable quelle que soit la borne supérieure Y d'intégration que l'on prend. Comme $K'_p = 0$, on a :

$$Y_p(Y) = - \int_0^Y R''(t) dt \quad (II.69)$$

Reportons dans (II.68), on a donc :

$$P(0) e^{\psi(0)} - P(Y) e^{\psi(Y)} - \int_0^Y \gamma_p Y_p e^{\psi(t)} dt = 0 \quad (II.70)$$

Posons

$$F(Y) = \int_0^Y Y_p(t) \gamma_p e^{\psi(t)} dt \quad (II.71)$$

On peut donc calculer $F(Y)$ en tout point ce qui nous permettra de calculer Y_p ; cependant, vu le terme en e^{ψ} , ce calcul sera rapidement impossible si la polarisation est élevée. On posera donc

$$G(Y) = \int_0^Y Y_p(t) \gamma_p e^{\psi(t) - \psi(Y)} dt \quad (II.72)$$

si par exemple la fonction ψ est croissante en Y ou une expression similaire telle que l'exposant de l'exponentielle soit négatif si $\psi(Y)$ est décroissante.

Considérons deux points voisins Y et $Y+h$, on a

$$G(Y) = P(0) e^{\psi(0) - \psi(Y)} - P(Y) \quad (II.73)$$

$$G(Y+h) = P(0) \cdot e^{\psi(0) - \psi(Y+h)} - P(Y+h) \quad (II.74)$$

et par ailleurs

$$G(Y+h) = e^{\psi(Y) - \psi(Y+h)} \cdot G(Y) + \int_Y^{Y+h} \gamma_p Y_p(t) e^{\psi(t) - \psi(Y+h)} dt \quad (II.75)$$

en éliminant $G(Y+h)$ et $G(Y)$ entre les expressions (II.73), (II.74) et (II.75), on peut donc connaître la valeur de l'intégrale

$$\int_Y^{Y+h} \gamma_p Y_p(t) e^{\psi(t) - \psi(Y+h)} dt$$

soit

$$\int_Y^{Y+h} \gamma_p Y_p(t) e^{\psi(t) - \psi(Y+h)} dt = P(Y) e^{\psi(Y) - \psi(Y+h)} - P(Y+h) \quad (II.76)$$

On déduira $Y_p(Y+h)$ de la relation (II.76) en remplaçant l'intégrale par une relation approchée en supposant que le courant est constant sur la maille et de même γ_p et en remplaçant

$$\int_Y^{Y+h} e^{\psi(t) - \psi(Y+h)} dt$$

par une relation approchée tenant compte du caractère exponentiel de la fonction. On a par exemple :

$$Y_p(Y+h) = \frac{P(Y) e^{\psi(Y) - \psi(Y+h)} - P(Y+h)}{\frac{h \cdot \gamma_p (1 - e^{\psi(Y) - \psi(Y+h)})}{\psi(Y+h) - \psi(Y)}} \quad (II.77)$$

on a donc cette fois une relation précise donnant la valeur du courant Y_p en fonction des inconnues principales.

On calculerait de même la composante en X mais cette fois on évaluerait la quantité $R'(Y+h)$ par une expression similaire à (II.77) ce qui permettrait de calculer K_p à partir duquel on calculera X_p par la relation (II.63). Ce calcul est légèrement plus long que pour la composante en Y mais il est tout aussi précis.

Cette façon de faire est très rapide et fournit la valeur du courant avec une bonne précision, en effet la seule approximation faite consiste à calculer avec une formule appropriée la valeur d'une intégrale dans un pas de discrétisation.

II.4.8 Programmes réalisés

Nous avons évoqué, à plusieurs reprises, la nécessité, pour analyser plus particulièrement tel ou tel phénomène, de modifier des parties parfois importantes du programme. Afin de faciliter au maximum de telles modifications, nous avons choisi d'écrire nos programmes sous forme modulaire en affectant un sous-programme particulier à chaque tâche fonctionnelle du programme. Nous avons ainsi obtenu un programme principal de 100 à 150 cartes Fortran qui gère uniquement le choix entre méthode locale ou globale et qui analyse l'évolution des résidus pour arrêter le processus quand la convergence est atteinte. Ce programme utilise 8 à 10 sous-programmes de 50 à 500 cartes Fortran dont certains sont optionnels. On trouvera en annexe les algorithmes de ces divers programmes.

Nous avons utilisé exclusivement le langage Fortran IV pour générer deux versions différentes :

- l'une utilisable sous système O.S.
- l'autre sous système conversationnel CP/CMS,

qui nécessitent chacune une région de l'ordre de 300 K octets. En fait cette grande zone mémoire est nécessitée par le fait que nous avons chargé en permanence tous les tableaux nécessaires aux calculs. Ceci est absolument indispensable si l'on veut utiliser la méthode des directions alternées (sinon l'utilisation de mémoires lentes serait par trop coûteuse). Par contre si l'on fait une relaxation par ligne ou par bloc, il sera toujours possible d'arranger les mémoires de façon systématique pour qu'une suite de lecture et d'écritures sur des mémoires lentes puisse nous permettre de diminuer sensiblement la taille de mémoire rapide (par exemple pour une relaxation par ligne il suffit d'avoir en mémoire rapide trois lignes consécutives). Une telle façon de faire n'a pas été programmée à l'heure actuelle mais nous pensons que cela ne doit pas augmenter sensiblement le temps de calcul effectif (temps C.P.U.). Par contre, sur des machines ne travaillant pas en temps partagé, cette forme de programmation entraînera nécessairement une augmentation sensible du temps de calcul vu les temps importants utilisés pour les accès aux mémoires lentes.

CHAPITRE III

AMELIORATIONS DES PERFORMANCES DES PROGRAMMESIII.1 GENERALITES SUR LES PERFORMANCES DES PROGRAMMES

Les programmes que nous avons écrits selon les méthodes et algorithmes décrits au chapitre précédent permettent d'obtenir, en tout point du domaine, les concentrations de porteurs électrons et trous et le potentiel électrostatique. Cependant, vu la complexité du problème mathématique traité, le calcul complet est souvent assez coûteux en temps machine (du moins pour les modèles bidimensionnels).

Nous avons donc été amené très rapidement à essayer de réduire le temps de calcul de nos programmes. Le temps calcul est lié à un certain nombre de paramètres tels que :

- Nombre de points, grandeur des pas
- Choix des coefficients de sur-relaxation ou d'accélération (méthode de Peaceman - Rachford)
- Choix de la méthode de résolution indirecte des systèmes
- "Valeur" du vecteur de départ
- Choix entre méthode globale et locale.

Le choix est absolument libre pour certains des paramètres (choix de la méthode de résolution des systèmes par exemple), par contre nous avons des contraintes assez sévères à respecter pour d'autres (nombre de points et grandeur des pas). Nous allons étudier successivement ces divers points et indiquer les solutions que nous avons utilisées pour fixer ces divers paramètres.

III.2 CHOIX DE LA SOLUTION INITIALE

On conçoit aisément que le nombre d'itérations sera fortement lié à la "valeur" de la solution initiale. Cependant, et c'est un fait commun à toutes les méthodes numériques, la norme des vecteurs résidus décroît en général très rapidement au début du processus itératif puis décroît de plus en plus lentement quand le vecteur itéré tend vers la solution.

On ne pourra donc pas espérer, en affinant de plus en plus la solution initiale, continuer à améliorer le temps de calcul de la solution. Par ailleurs il ne faut pas se désintéresser par trop de ce problème car, si on partait d'un vecteur initial trop éloigné de la solution, la méthode pourrait ne plus converger. En outre, vu la forme des expressions que nous sommes amené à calculer, le traitement machine nous impose des contraintes supplémentaires. En particulier il ne faut, à aucun moment, obtenir une correction sur ψ supérieure à 172. Ceci se

produira essentiellement quand nous traiterons des cas de forte polarisation.

Les solutions de départ intéressantes feront donc appel à des théories simplifiées plus ou moins élaborées (23, 27, 39, 48) qu'il faudra programmer de façon à initialiser les diverses mémoires utilisées dans le calcul.

III.2.1 Problème unidimensionnel

Le problème posé pour le modèle unidimensionnel est relativement simple à résoudre : en effet vu l'intégration partielle que nous avons réussi à faire, il nous suffit, pour pouvoir commencer le processus, de calculer la valeur approchée de la fonction ψ . En outre de nombreux modèles simplifiés unidimensionnels ont été réalisés (23, 39, 48) pour la jonction PN et pour le transistor bipolaire.

La plupart de ces modèles se rapportent à une jonction abrupte (i.e. le dopage est discontinu et prend deux valeurs distinctes dans les zones P et N). Pour traiter une jonction non abrupte, nous définissons la "jonction abrupte correspondante" comme étant la jonction abrupte de même géométrie et dont les concentrations de dopage sont celles des deux extrémités de la jonction graduelle étudiée. Nous étudions alors la jonction abrupte ainsi définie et utilisons la fonction ψ obtenue comme vecteur de départ (50).

III.2.1.1 Théorie simplifiée des jonctions abruptes

- Polarisation inverse ou directe faible

Nous étudions une jonction abrupte dont les dopages sont N_A et N_D . On coupe le segment AB en 3 sous-segments (figure III.1)

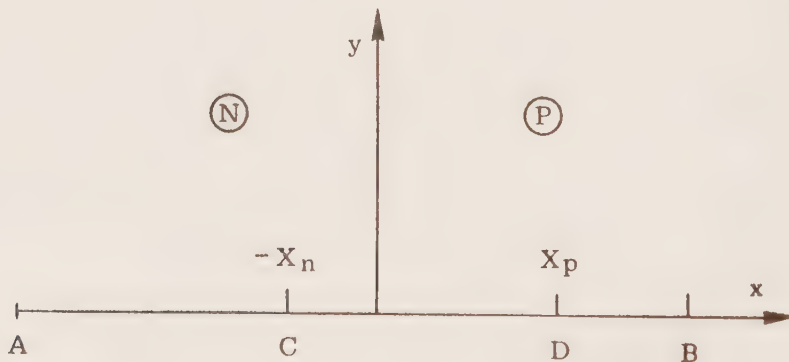


Figure III.1 - Initialisation unidimensionnelle

[A C] , [C D] , [D B]

où l'on suppose :

sur A C la charge d'espace est nulle : zone N

D B " " " " : zone P

C D zone de charge d'espace, les concentrations en porteurs libres sont nulles.

On néglige bien évidemment la recombinaison.

Nous prendrons en outre :

$$\psi(C) = \psi(A) \quad \text{et} \quad \psi(D) = \psi(B)$$

Dans les zones N et P on prend le potentiel constant, soit $-X_n$ l'abscisse de C et X_p celle de D. On a donc, pour $-X_n < X < 0$

$$\frac{d^2\psi}{dX^2} = -N_D \quad (\text{III.1})$$

soit

$$\psi(X) = -\frac{N_D}{2} X^2 + EX + F \quad (\text{III.2})$$

et pour $0 < X < X_p$

$$\frac{d^2\psi}{dX^2} = N_A \quad (\text{III.3})$$

soit

$$\psi(X) = \frac{N_A}{2} X^2 + E'X + F' \quad (\text{III.4})$$

On déduit les valeurs de E, E', F, F' des conditions aux limites en C et D.

- au point 0 on impose la continuité de la fonction ψ et de sa dérivée $\frac{d\psi}{dX}$.

On a :

$$\psi(0) = F = F' \quad (\text{III.5})$$

- par continuité en C et D on prend

$$\frac{d\psi}{dX} = 0 \quad (\text{III.6})$$

On a donc :

$$N_D X_n + E = N_A X_p + E' = 0 \quad (\text{III.7})$$

soit donc

$$\psi(X) - \psi(0) = -\frac{N_D}{2} (X^2 - 2X \cdot X_n) \quad (\text{III.8})$$

pour $-X_n \leq X \leq 0$ et pour $0 \leq X \leq X_p$

$$\psi(X) - \psi(0) = \frac{N_A}{2} (X^2 - 2X X_p) \quad (\text{III.9})$$

D'après la continuité de $\frac{d\psi}{dX}$ au point 0 on a

$$\left(\frac{d\psi}{dX}\right)_0 = N_D X_n = N_A X_p \quad (\text{III.10})$$

On en déduit les valeurs de X_n et X_p , soit :

$$X_n = \sqrt{\frac{(\psi(A) - \psi(B)) \cdot 2 N_A}{N_D (N_A + N_D)}} \quad (\text{III.11})$$

et

$$X_p = \sqrt{\frac{(\psi(A) - \psi(B)) \cdot 2 N_D}{N_A (N_A + N_D)}} \quad (\text{III.12})$$

d'où l'on tire $\psi(0)$, soit

$$\psi(0) = \psi(A) \cdot \frac{N_D}{N_A + N_D} + \psi(B) \cdot \frac{N_A}{N_A + N_D} \quad (\text{III.13})$$

- Polarisation directe forte

Dans les cas de forte polarisation directe (i.e. polarisation appliquée supérieure à la barrière de potentiel) le modèle ci-dessus ne peut plus s'appliquer. Nous supposons alors avoir une répartition linéaire du potentiel dans chacune des deux parties de la jonction, la pente de ces deux segments est calculée d'après la résistivité des matériaux.

III.2.1.2 Vecteur initial pour un transistor bipolaire

Des études simplifiées existent également pour le transistor bipolaire mais elles sont relativement complexes, aussi nous avons préféré considérer le transistor comme la juxtaposition de deux diodes et appliquer à chacune de ces diodes le modèle exposé précédemment. Cette façon de faire a toujours fourni un vecteur de départ satisfaisant mais le nombre d'itérations nécessaire pour obtenir la solution est nettement plus élevé que pour la jonction PN.

Nous avons aussi essayé d'utiliser comme vecteur de départ la juxtaposition des résultats du calcul des deux jonctions PN émetteur base et collecteur base fournis par le modèle de jonction PN. Ce vecteur initial est nettement meilleur que le précédent, surtout dans le cas le plus courant de dopages graduels. Cependant le temps de calcul nécessaire pour obtenir ce vecteur ψ_0 est parfois important et le temps total pour obtenir la solution complète sur le transistor peut être supérieur à celui observé en utilisant la première solution proposée.

III.2.2 Problème bidimensionnel

Vu la méthode de résolution employée, il faut cette fois définir un vecteur de départ pour ψ , N et P . En outre il n'existe pas de modèle bidimensionnel simple à utiliser pour calculer le vecteur de départ. Nous avons donc utilisé les modèles unidimensionnels pour générer les vecteurs de départ de l'étude bidimensionnelle.

III.2.2.1 Jonction PN

Nous considérons la jonction PN bidimensionnelle (figure III.2) comme une association de jonctions PN unidimensionnelles dans les deux directions. On étudie donc le modèle unidimensionnel de la jonction située sur l'axe $A A' E F D$ et l'on calcule donc ψ , N et P sur cet axe. Sur le rectangle $A' G' O' D$ on considère que l'on a sur toutes les lignes du maillage, égalité avec la ligne $A' E F D$.

Supposant que le dopage varie, dans la région $G' H I' J$ en fonction de Y , comme il varie dans la région $E' M' L' F$ en fonction de X , on reporte en fonction de Y les fonctions ψ , N , P obtenues en fonction de X pour le modèle unidimensionnel étudié. On complète ensuite dans la région $I' J K L'$ en traçant des courbes de niveau parallèles à la courbe $E' I G$ et dans le reste du domaine les fonctions ψ , N , P seront prises constantes, égales à $\psi(D)$, $N(D)$, $P(D)$.

Nous avons, pour la clarté des figures, montré un modèle de jonction abrupte pour laquelle les lignes $E M G'$ et $F K H$ représentent les limites de la charge d'espace.

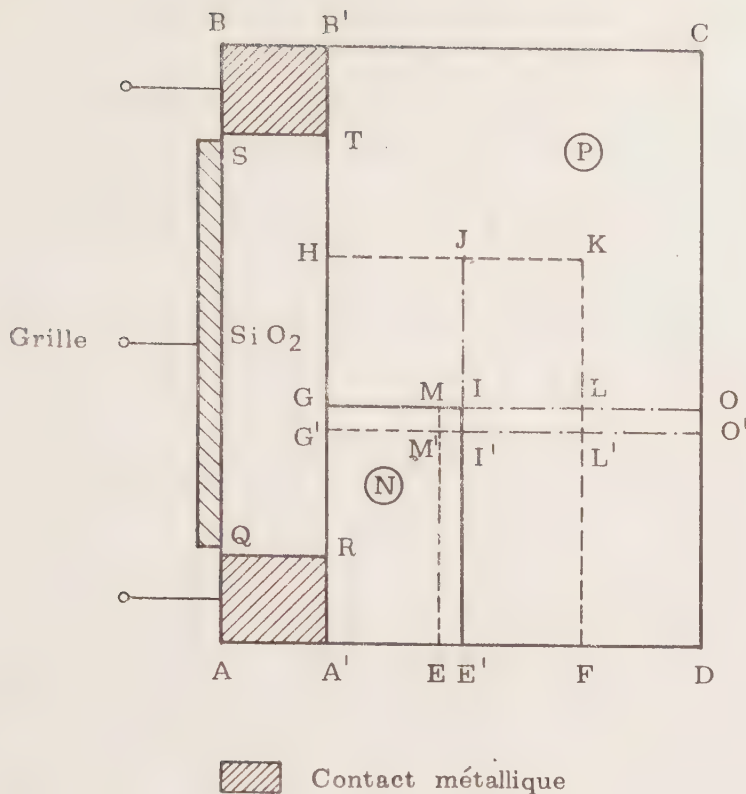


Figure III.3 - Modèle bidimensionnel de jonction PN, génération du vecteur de départ.

Une telle méthode peut, bien sûr, s'appliquer à tout autre type de dopage. En fait ceci revient à supposer que les courbes de niveau pour ψ , N et P sont les mêmes que pour le dopage.

Nous avons fait en outre l'hypothèse que le dopage varie en fonction de Y, dans la zone G' I' J H comme en fonction de X dans la zone E M' L' F. Cette hypothèse est fautive en général mais ceci évite d'avoir à refaire un autre calcul sur le modèle unidimensionnel et d'autre part l'erreur introduite n'a jamais été telle que cette initialisation entraîne des difficultés de convergence.

On complète ensuite le vecteur ψ dans l'oxyde en supposant que ψ varie linéairement entre la valeur sur la grille et la valeur que l'on a calculée précédemment sur l'interface. Ce dernier point est parfaitement justifié si la polarisation appliquée est faible sur la diode et si la grille est faiblement polarisée. Si cela n'est pas le cas, l'influence de la grille peut être importante et modifier sensiblement le potentiel en surface. Cette modification devra éventuellement être introduite dans le calcul de la solution initiale pour éviter tout incident arithmétique lors des premières itérations. On pourra également fortement sous relaxer durant les premières itérations pour absorber les fortes corrections résultant de la mauvaise initialisation. Cette forme d'initialisation nous a permis de calculer sans ennui les cas d'études que nous avons traités jusqu'à présent.

III.2.2.2 Transistor bipolaire

Comme pour le modèle unidimensionnel, nous avons considéré le transistor bipolaire comme juxtaposition de deux jonctions PN pour lesquelles nous utilisons l'initialisation exposée ci-dessus (il serait bien évidemment absurde de mener les calculs en bidimensionnel pour

les deux jonctions PN, pour ensuite utiliser leurs résultats afin d'initialiser le modèle de transistor).

On aurait pu, utilisant un autre découpage, étudier le transistor unidimensionnel pour initialiser le modèle bidimensionnel. Nous avons préféré utiliser deux jonctions PN pour deux raisons :

- Impossibilité d'évaluer de façon précise la chute de potentiel dans la base entre le contact métallique et le point situé sur l'axe;
- nécessité de calculer un modèle de transistor puis un modèle de diode (jonction base collecteur) qui entraîneraient des calculs plus longs pour une précision similaire, sinon moins bonne.

Comme pour la jonction PN, on négligera les effets dus à la présence des électrodes de garde en supposant que le potentiel varie linéairement dans l'oxyde.

III.2.2.3 Transistor M.O.S.

L'étude dans le semi-conducteur sera identique à celle du transistor bipolaire. On considèrera en effet le M.O.S.T. comme la juxtaposition de deux diodes. Par contre, ici, il semble irréaliste de négliger l'influence de la grille puisqu'elle joue un rôle fonctionnel.

Nous avons donc essayé d'utiliser un modèle unidimensionnel de M.O.S. (27) qui nous permet de calculer l'épaisseur du canal et la valeur du potentiel à l'interface Si - SiO₂. On utilisera ceci pour initialiser toute l'épaisseur du canal en supposant que le potentiel y a une répartition de type parabolique en X.

On initialisera ensuite le potentiel dans l'oxyde par interpolation linéaire entre sa valeur sur la grille et sa valeur à l'interface.

Pour obtenir une initialisation complète il faut réussir à calculer N et P dans le canal et combiner les effets de la grille et des jonctions drain substrat et source substrat dans les zones où ces effets se superposent.

On peut résoudre ce dernier problème en se contentant d'une combinaison linéaire à coefficients variables du type

$$\psi = \alpha \psi_1 + (1 - \alpha) \psi_2 \quad (III.14)$$

où ψ_1 représente l'effet de la grille

ψ_2 " " de la jonction PN,

et où α varie de 0 à 1 en fonction de l'abscisse et l'ordonnée du point considéré.

De même, le calcul de N et P ne présente pas de difficulté insurmontable, mais il est nettement plus délicat que celui de ψ . En fait il semble que l'on puisse se contenter, comme on l'a fait jusqu'à présent pour le calcul des résultats que nous présentons, d'évaluer grossièrement l'influence de la grille sur les porteurs ou même la négliger.

III.3 CONSTRAINTES SUR LE MAILLAGE

Etant donné la forme des fonctions et leurs variations extrêmement rapides dans certaines zones du domaine, il a été indispensable de prendre un maillage dont les longueurs de pas varient, pour les deux variables géométriques X et Y . Cependant le choix des pas ne peut se faire de façon purement arbitraire. En effet la discrétisation introduit une erreur systématique, fonction de la longueur du pas. En outre la forme exponentielle des coefficients apparaissant dans les équations discrétisées interdit d'admettre des variations trop élevées de ψ sur un intervalle et donc introduit une contrainte prioritaire sur le choix du maillage.

Sans qu'il soit possible de le démontrer, nous avons remarqué que le nombre d'itérations nécessaire pour obtenir une solution était une fonction croissante du nombre de points utilisés. En outre le temps de calcul nécessaire pour une itération est approximativement fonction linéaire du nombre de points. Ces deux considérations nous incitent à limiter le nombre total de points. Il est bien évident par contre que la précision des résultats est d'autant plus élevée que le nombre de points est grand (sauf si l'on prenait des nombres très élevés, mais ceci est impossible en ce cas, vu la limitation imposée par la taille mémoire disponible). Selon le but recherché par l'analyse on choisira donc tel ou tel maillage en fonction de la précision désirée et de la finesse du maillage nécessaire pour obtenir un nombre de points significatifs suffisant en certaines zones (zones de charge d'espace ou canal des transistors M.O.S. par exemple).

III.3.1 Erreurs prépondérantes

La précision des résultats sera fonction essentiellement de l'erreur de discrétisation. En effet tous les calculs sont faits en double précision (sur le matériel utilisé, ceci ne coûte rien en temps machine car le calcul en double précision améliore la stabilité du processus et diminue le nombre d'itérations, ce qui permet de compenser l'augmentation du temps due au calcul en double précision). On peut donc négliger les erreurs de troncature. Par ailleurs, les méthodes numériques utilisées pour résoudre les systèmes sont assez performantes du point de vue précision pour que l'on puisse négliger l'erreur qu'elles introduisent devant les erreurs de discrétisation. Les relations utilisées reposent sur les formules de Taylor et le théorème de Green. On écrit par exemple pour une équation auto-adjointe :

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left(A(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(A(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right) + B(x, y) \cdot u(x, y) = f(x, y) \quad (\text{III.15})$$

A tout point du maillage on associe le domaine R_h (figure III.3) limité par les droites

$$\begin{aligned} x &= x_i - \frac{h_i - 1}{2}, & x &= x_i + \frac{h_i}{2} \\ y &= y_j - \frac{m_j - 1}{2}, & y &= y_j + \frac{m_j}{2} \end{aligned} \quad (\text{III.16})$$

et on appelle Γ_h la frontière.

En intégrant l'équation (III.15) sur R_h on obtient :

$$-\iint_{R_h} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(A \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(A \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] dx \cdot dy + \iint_{R_h} B \cdot u \, dx \, dy = \iint_{R_h} f \, dx \cdot dy \quad (\text{III.17})$$

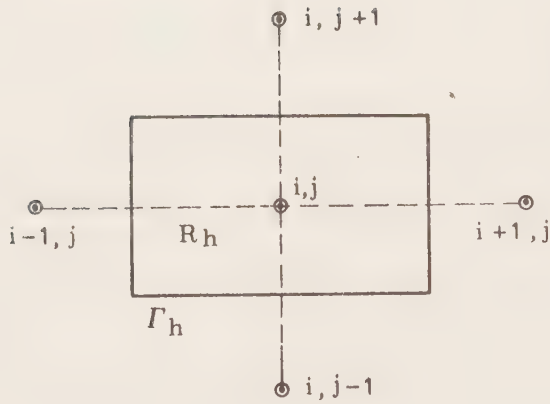


Figure III.3 - Domaine d'intégration élémentaire.

que l'on écrit, d'après le théorème de Green :

$$-\int_{\Gamma_h} A \frac{\partial u}{\partial x} \cdot dy - A \frac{\partial u}{\partial y} \cdot dx + \iint_{R_h} B \cdot u \cdot dx \cdot dy = \iint_{R_h} f \cdot dx \cdot dy \quad (\text{III.18})$$

On remplace ensuite la valeur des deux intégrales doubles par des expressions du type

$$\iint_{R_h} f \cdot dx \cdot dy \neq f_{i,j} \cdot \frac{(h_i + h_{i-1})(m_j + m_{j-1})}{4} \quad (\text{III.19})$$

alors qu'il conviendrait d'écrire, d'après le théorème de la moyenne :

$$\iint_{R_h} f \cdot dx \cdot dy = f(p) \frac{(h_i + h_{i-1})(m_j + m_{j-1})}{4} \quad (\text{III.20})$$

où p est un point de R_h . On a donc commis une erreur

$$\Delta = \frac{(h_i + h_{i-1})(m_j + m_{j-1})}{4} \left| f(p) - f_{i,j} \right| \quad (\text{III.21})$$

soit donc

$$\Delta \text{ de type } h^3 \left(\left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \right)$$

Par ailleurs on remplace l'intégrale curviligne par l'expression :

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_h} A \cdot \frac{\partial u}{\partial x} \cdot dy - A \frac{\partial u}{\partial y} \cdot dx &\neq \left(\frac{m_{j-1} + m_j}{2} \right) \left[A_{i+1/2,j} \cdot \left(\frac{u_{i,j} - u_{i+1,j}}{h_i} \right) + A_{i-1/2,j} \cdot \left(\frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h_{i-1}} \right) \right] \\ &+ \frac{h_{i-1} + h_i}{2} \left[A_{i,j+1/2} \cdot \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j+1}}{m_j} \right) + A_{i,j-1/2} \cdot \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{m_{j-1}} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{III.22})$$

alors qu'il conviendrait d'écrire

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_h} A \frac{\partial u}{\partial x} \cdot dy - A \frac{\partial u}{\partial y} \cdot dx &= \frac{m_{j-1} + m_j}{2} \left[A(p_1) \cdot \frac{\partial u}{\partial x}(p_1) - A(p_2) \cdot \frac{\partial u}{\partial x}(p_2) \right] \\ &+ \frac{h_{i-1} + h_i}{2} \left[A(p_3) \frac{\partial u}{\partial y}(p_3) - A(p_4) \frac{\partial u}{\partial y}(p_4) \right] \end{aligned} \quad (\text{III.23})$$

où p_1 , p_2 , p_3 , p_4 sont des points situés sur chacun des 4 segments formant Γ_h .

Sur l'évaluation des dérivées, on commet une erreur qui sera d'ordre 2 en h

$$\left(h^2 \left| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right| \quad \text{ou} \quad h^2 \left| \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right| \right)$$

Sur l'évaluation des termes $A(p_i)$ on commet, pour notre problème, une erreur en $e^{\Delta\psi}$.

D'après la forme de la relation de discrétisation, on sait que l'erreur globale peut être ramenée à l'ordre 3. Ceci nécessite que les coefficients A soient proches. On voit apparaître ici la principale contrainte sur le maillage qui est liée à la forme des termes A , fonction exponentielle de ψ .

Pour obtenir une bonne précision, il faudra donc que les écarts $\Delta\psi$ entre points successifs soient de même ordre de grandeur, à défaut on pourrait introduire une erreur de discrétisation d'ordre 2, qui est l'ordre des dérivées que l'on a à évaluer.

On ne pourra donc pas faire de changement de pas trop important dans les zones où le potentiel varie. En fait il semble qu'il y ait intérêt à choisir le maillage pour que les variations de potentiel en 2 intervalles consécutifs soient de valeur sensiblement égale. Si le choix des pas n'est pas fait correctement, on constate l'apparition de points anguleux sur les résultats obtenus par le processus. En ce cas les résultats sont localement erronés mais restent en général qualitativement corrects. Nous avons pu vérifier sur plusieurs exemples que, en utilisant un autre maillage, on pourrait toujours faire disparaître ces points erronés.

III.4 CHOIX DE LA METHODE DE RESOLUTION

Nous avons proposé, au chapitre précédent, trois méthodes différentes de résolution des systèmes d'équations que nous sommes amené à écrire après discrétisation. En fait, choisir l'une de ces méthodes revient à définir une application de R^L dans lui-même, dont on recherche le point fixe. La rapidité de convergence dépendra donc, pour un maillage donné et une solution de départ fixée, uniquement de la valeur du coefficient de contraction s'il existe⁽¹⁴⁾. Il est illusoire de chercher à calculer ce coefficient de Lipchitz. Il serait même quasiment impossible de l'évaluer car cela nécessiterait de mener parallèlement le calcul avec 2 vecteurs différents et de le répéter un nombre important de fois pour obtenir une borne supérieure du coefficient de contraction.

Afin de comparer les vitesses respectives de convergence des diverses méthodes proposées, nous avons donc dû nous contenter de les mettre successivement en oeuvre sur un certain nombre de cas déterminés et de comparer le nombre d'itérations et le temps de calcul nécessaires à chacune des méthodes.

Nous avons observé tout d'abord que la méthode de relaxation par point nécessitait 3 à 4 fois plus d'itérations que la relaxation par bloc ou la méthode des directions alternées. Les itérations par la méthode de relaxation par point étant légèrement plus rapides que les autres,

le rapport en temps est moins défavorable, mais la méthode de relaxation par point reste toujours nettement plus coûteuse (rapport 2 à 3). Nous avons donc abandonné cette première méthode.

Le choix entre la relaxation par blocs ou la méthode des directions alternées est beaucoup plus difficile. En effet nous avons constaté que la méthode des directions alternées nécessite environ 2 fois moins d'itérations que celle de la relaxation par blocs, mais chaque itération nécessite 2 fois plus de temps. Ce qui fait que les deux méthodes sont sensiblement équivalentes du point de vue temps utilisé. En fait il semble que si le maillage est assez grossier, la méthode des directions alternées est plus rapide alors que dans le cas d'un maillage fin, la méthode de relaxation par blocs l'emporte légèrement. Ces comparaisons ont été faites en prenant toujours les coefficients de sur-relaxation égaux à un et en ne prenant pas de coefficient accélérateur pour la méthode de Peaceman-Rachford.

III.5 ACCELERATIONS POSSIBLES

La première possibilité d'accélération est liée à l'emploi de la sur-relaxation ou de coefficients accélérateurs pour la méthode de Peaceman-Rachford. Par ailleurs nous avons constaté que, après un certain nombre d'itérations, seules certaines zones du dispositif subissaient encore des corrections. S'inspirant alors de la méthode de Southwell, nous avons pu obtenir une très importante amélioration.

III.5.1 Evaluation du coefficient de sur-relaxation

Il est bien sûr impossible de calculer le coefficient optimal de sur-relaxation. En effet cela nécessiterait le calcul du rayon spectral de 3 matrices d'ordre lc et ceci pour chacune des itérations successives car, le problème traité étant non linéaire, les matrices des trois sous-systèmes changent à chaque itération. Un tel calcul est pratiquement impossible, en outre il nécessiterait beaucoup plus de temps que la détermination exacte du coefficient optimal n'en ferait gagner. Nous avons donc essayé de déterminer le comportement asymptotique de la solution. On peut admettre que les fonctions inconnues restant quasiment inchangées, les matrices rencontrées tendent vers une limite pour laquelle nous évaluerons le rayon spectral de la matrice de Jacobi associée à la méthode et l'on obtiendra alors le coefficient optimal ⁽¹³⁾

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2}} \quad (\text{III.24})$$

Pour évaluer le rayon spectral ρ on utilisera nécessairement une méthode de la puissance itérée. Ceci nécessiterait donc de stopper le calcul après un certain nombre d'itérations et de commencer la méthode de la puissance itérée, qui demanderait elle aussi un certain nombre d'itérations supplémentaires. Le calcul serait à refaire pour chaque cas traité car la matrice obtenue change à chaque exemple. Cette méthode serait par trop coûteuse aussi nous avons essayé d'évaluer le rayon spectral au fur et à mesure que progresse le calcul de la solution elle-même. Ceci est possible en ce cas car la matrice utilisée est tridiagonale par blocs. On peut alors écrire l'itération sous la forme suivante :

$$A = \begin{pmatrix} D_1 & F_1 & & & \\ E_1 & D_2 & F_2 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & F_{\ell-1} \\ & & & E_{\ell-1} & D_{\ell} \end{pmatrix} \quad (\text{III.25})$$

et en considérant un ordre consistant avec la représentation de A , on a :

$$A_1 = \begin{pmatrix} D_1 & & & & \\ E_1 & D_2 & & 0 & \\ & E_2 & & & \\ & & & \ddots & \\ & & 0 & & E_{\ell-1} & D_{\ell} \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 0 & F_1 & & & \\ & 0 & & & \\ & & & & \\ & & & & F_{\ell-1} \\ & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.26})$$

$$A_1 X_{(p+1)} = B - A_2 X_p \quad (\text{III.27})$$

soit en posant

$$X_{p+1} = X_p + \delta_p \quad (\text{III.28})$$

on a :

$$A_1 (X_p + \delta_p) = B - A_2 X_p \quad (\text{III.29})$$

soit, comme A_1^{-1} existe toujours

$$\delta_p = A_1^{-1} B - A_1^{-1} A_2 X_p - X_p \quad (\text{III.30})$$

or

$$X_p = X_{p-1} + \delta_{p-1} \quad (\text{III.31})$$

et

$$X_p = A_1^{-1} B - A_1^{-1} A_2 X_{p-1} \quad (\text{III.32})$$

on en tire

$$\delta_p = -A_1^{-1} A_2 \delta_{p-1} \quad (\text{III.33})$$

Or la matrice $-A_1^{-1} A_2$ est celle dont il faut déterminer le rayon spectral pour connaître ω_{opt} . Si nous calculons $\lambda_{\min}$ et $\lambda_{\max}$ les bornes inférieures et supérieures des rapports de deux corrections successives en un point et que $\lambda_{\min}$ et $\lambda_{\max}$ ont une même limite, alors cette limite est le rayon spectral de la matrice.

Nous avons essayé de mettre en oeuvre cette méthode mais malheureusement les deux bornes $\lambda_{\min}$ et $\lambda_{\max}$ ne tendaient pas vers une limite, avant que nous n'ayons obtenu convergence. Par contre nous avons pu constater que $\lambda_{\min}$ restait toujours négatif. Cela laisse à penser que le vecteur itéré oscille autour de la solution. Nous avons essayé de vérifier cette hypothèse sur un certain nombre de points, dans différents cas d'étude, et toujours nous avons obtenu cette oscillation. Ce résultat est très intéressant car il tend à montrer que, même si la précision demandée est assez grossière, le résultat obtenu est toujours très proche de la solution exacte.

Une autre méthode d'évaluation de ω_{opt} peut consister à faire plusieurs essais en prenant diverses valeurs de ω et en essayant d'obtenir la convergence la plus rapide en modifiant le coefficient ω sur le segment $]0, 2[$ par dichotomie par exemple. Une telle méthode est très difficile à employer en ce cas car nous avons 3 coefficients différents à ajuster; en outre, vu la non linéarité du problème, d'une part chacune de ces trois valeurs varie au cours du processus, d'autre part chaque cas étudié nécessite de recommencer le calcul. Plutôt que d'utiliser un processus systématique, nous avons préféré utiliser les possibilités que nous offrait le système conversationnel CP/CMS sur lequel nous avons mis au point les programmes. Nous avons observé certaines tendances générales de la variation souhaitable des valeurs des coefficients ω , mais là encore, il sera nécessaire d'acquérir une certaine expérience pour déterminer au mieux les coefficients de sur-relaxation.

Nous avons remarqué qu'il était intéressant de sous-relaxer, parfois fortement, les équations en N et P alors qu'une sur-relaxation sur ψ est bénéfique. En outre il convient, quand la correction sur N et P diminue, d'augmenter les coefficients ω_N et ω_P et de les amener progressivement à 1 en fin de calcul, sinon parfois à 1,2 - 1,3 pour obtenir une légère sur-relaxation. Il faudra également faire croître ω_ψ de 1 à 1,8 environ au cours du processus. En utilisant simplement cette évaluation grossière des coefficients de sur-relaxation, nous avons réussi à gagner 1/10 à 1/8 du temps calcul nécessaire pour obtenir une solution.

III.5.2 Evaluation du coefficient d'accélération de la méthode de Peaceman Rachford.

De façon classique, on montre ⁽⁵⁶⁾ que la méthode des directions alternées converge le plus rapidement si l'on utilise de façon cyclique un certain nombre de valeurs différentes du coefficient accélérateur et que, en ce cas, on peut se ramener à une méthode de Gauss-Seidell.

Le problème est encore plus complexe que l'évaluation du coefficient de sur-relaxation et, comme nous l'avons vu, il ne comporte pas de solution théorique.

Nous avons également essayé de déterminer grossièrement des valeurs efficaces des coefficients, mais nous n'avons pas réussi à définir de tendance générale car, selon les cas traités, les valeurs qui se révélaient efficaces étaient très différentes.

III.5.3 Limitation du domaine de calcul

L'analyse que nous avons faite de l'évolution du vecteur itéré nous a permis de constater que, assez rapidement, les corrections apportées au vecteur deviennent négligeables en certaines zones alors qu'en d'autres elles restent parfois importantes. Nous avons alors essayé, nous inspirant par là de la méthode de Southwell, de ne poursuivre le calcul que là où les corrections étaient significatives, en permettant bien sûr à une correction de se propager dans tout le domaine si nécessaire. Cela est assez facile à faire sur la méthode de sur-relaxation par blocs où par exemple on ne fera le calcul sur une ligne que si, à l'itération précédente, cette ligne ou l'une de ses deux voisines, a subi une correction supérieure au test d'arrêt. Cette amélioration est plus difficile à faire sur la méthode de Peaceman-Rachford car il faut en ce cas examiner les

corrections point par point pour pouvoir éliminer lignes ou colonnes du calcul. Cela se traduit par une programmation plus lourde et un gain moins important que sur la méthode de sur-relaxation par blocs.

Cette amélioration s'est révélée très importante sur la méthode L.S.O.R. car outre le fait que chaque itération devient moins coûteuse en temps (le calcul n'étant plus effectué que sur un nombre restreint de lignes), nous avons constaté une diminution importante du nombre d'itérations nécessaires pour satisfaire le test d'arrêt (de 30 à 70 itérations selon les cas). Cette remarque était d'ailleurs prévisible car on sait qu'en général, la méthode de Southwell nécessite moins d'itérations que la méthode de Gauss-Seidell.

Vu les améliorations que nous lui avons apportées et la meilleure connaissance que nous avons du coefficient de sur-relaxation, la méthode de sur-relaxation par blocs est donc celle qui fournira la solution dans le minimum de temps. C'est avec cette méthode que nous avons calculé les résultats que nous présentons au chapitre IV. Nous avons donné (figure III.4) sur un exemple de transistor bipolaire moyennement polarisé, l'influence de diverses améliorations apportées à la méthode de sur-relaxation par blocs. Avec cette méthode, le temps nécessaire pour le calcul d'une solution reste inférieur à 10 à 15 minutes, même pour les cas de forte polarisation. Dans les cas de faible ou moyenne polarisation, le temps de calcul varie de 3 à 10 minutes (sur ordinateur IBM 360-67 quand toutes les variables sont rangées en mémoire rapide).

Méthode L.S.O.R.	$\omega = 1$	ω variable	Limitation du du domaine	ω variable et limi- tation du domaine
N_b ite	220	179	153	121
temps	9' 10"	7' 30"	6' 10"	4' 30"

Figure III.4 - Influence des divers paramètres accélérateurs

CHAPITRE IV

EXEMPLES DE RESULTATSIV.1 PRESENTATION GENERALE

Il n'est pas possible, dans le cadre de ce texte, de donner l'ensemble des résultats que l'on pourrait obtenir avec la méthode que nous présentons. Cela nous amènerait en effet à étudier l'ensemble des phénomènes de conduction dans les semi-conducteurs et les effets secondaires de volume ou de surface pour lesquels a été entreprise cette étude. Afin de donner un aperçu des possibilités de l'outil que devrait être cette méthode, nous avons donc choisi d'examiner quelques problèmes précis pour lesquels une analyse bidimensionnelle est indispensable et en particulier, nous avons porté notre effort sur l'étude du transistor M.O.S. pour lequel la méthode proposée permet d'obtenir des renseignements qu'on ne pourrait obtenir par ailleurs.

Nous donnerons également quelques résultats concernant le transistor bipolaire et surtout les effets bidimensionnels observés dans ce dispositif (injection latérale, effets dus à la surface ...)

Par contre, nous ne présenterons pas de résultats obtenus par l'analyse unidimensionnelle en raison de leur publication antérieure (50, 51, 53). Par ailleurs l'intérêt porté à cette première étude et son utilisation effective dans plusieurs laboratoires pour l'optimisation des dispositifs et l'étude des phénomènes de base, montre bien l'efficacité de la méthode.

IV.2 ETUDE BIDIMENSIONNELLE DU TRANSISTOR M.O.S.

Afin de préciser le problème, nous traiterons ici des structures à canal P. Cependant il est évident que la méthode proposée s'applique également à l'étude de structures à canal N.

IV.2.1 Fonctionnement général du transistor M.O.S.

De nombreuses études ont été faites sur le fonctionnement du transistor M.O.S. aussi il n'entre pas dans nos intentions de les reprendre ici; on pourra se reporter aux travaux les plus classiques en la matière (16, 37, 45). Nous rappellerons brièvement le principe du fonctionnement du M.O.S. à canal P, dont la structure est représentée en figure IV.1.

Les deux jonctions PN source-substrat et drain-substrat seront toujours polarisées en inverse de façon à avoir un courant très faible entre les contacts métalliques correspondants; les diffusions des zones de type P étant en général réalisées simultanément, rien ne distingue technologiquement le drain et la source. La diode la moins polarisée par rapport au substrat

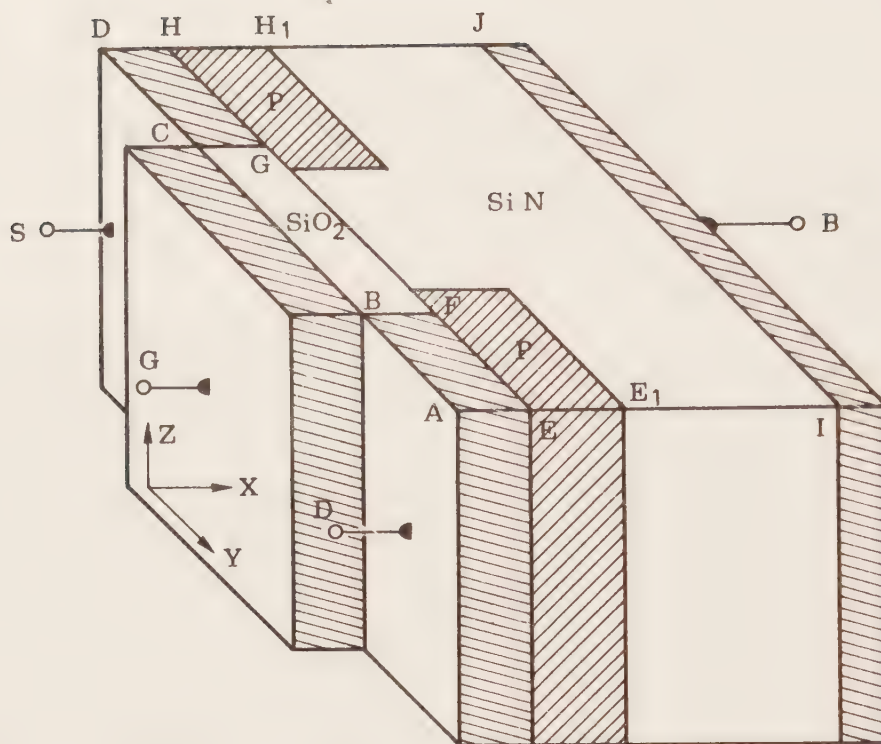


Figure IV.1 - Structure géométrique du transistor M.O.S.

représentera la source; en fait on laissera souvent cette diode en court-circuit avec la source ($V_{SB} = 0$).

Si l'on considère le dispositif à l'équilibre, on notera la présence de deux zones de charge d'espace autour des diffusions drain et source et d'un champ électrique faible près de l'interface $\text{SiO}_2 - \text{Si}$ dû à la présence de charges positives dans l'oxyde (il est en effet technologiquement impossible d'avoir un oxyde où il n'y ait aucune charge stockée). Ce phénomène n'est pas pris en compte actuellement dans notre modèle mais il pourrait être introduit de façon simple dans les programmes. Ce serait particulièrement intéressant pour étudier l'effet d'une distribution spatiale non uniforme de charges dans l'oxyde. Cependant il semble très difficile de connaître une telle répartition de charges.

Supposons maintenant qu'une tension négative soit appliquée sur le drain; la zone de charge d'espace de la jonction drain-substrat s'étend dans le substrat. Si la distance entre source et drain est très faible, il sera possible, en faisant croître la polarisation de la jonction drain-substrat, de produire un perçage en faisant se rejoindre les deux zones de charge d'espace. Ce phénomène sera toujours de nature bidimensionnelle, vu la présence du champ de surface. On verra que la méthode proposée permet de comprendre parfaitement ces phénomènes (cf. IV.2.5).

Portons maintenant la grille à un potentiel négatif. Le champ à l'interface commence par décroître puis, quand on dépasse la tension de seuil V_s , le champ change de signe et

attire les trous près de l'interface tandis qu'il repousse les électrons dans le volume.

Il apparaît donc le long de l'interface une zone où les trous deviennent majoritaires ce qui permet le passage du courant entre source et drain (canal conducteur). Le champ électrique transversal est important dans cette région ce qui crée une zone de charge d'espace le long de l'interface Si - SiO₂ au-dessous de la couche d'inversion. Tant que la polarisation drain-substrat est faible, le champ électrique transversal varie peu le long du canal et l'épaisseur de la couche d'inversion reste quasiment constante (figure IV.2)

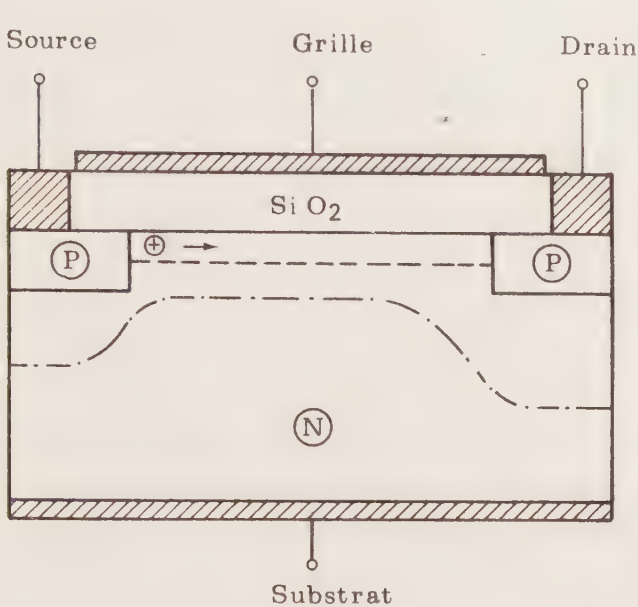


Figure IV.2 - Fonctionnement du M.O.S. en régime normal

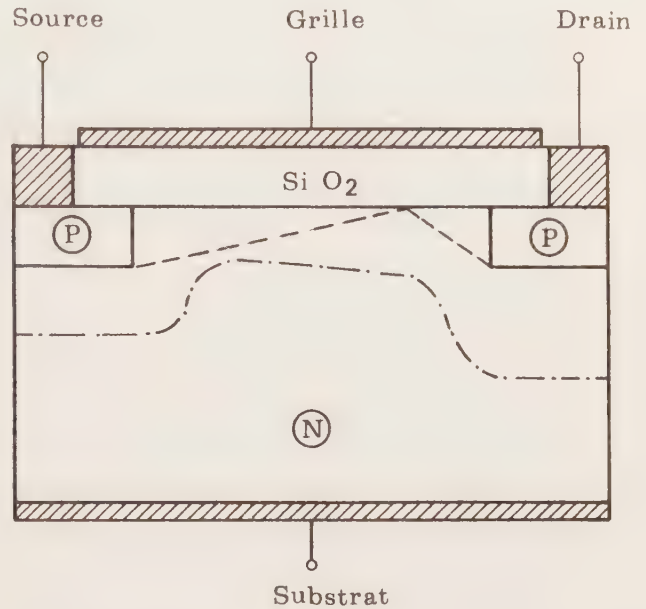


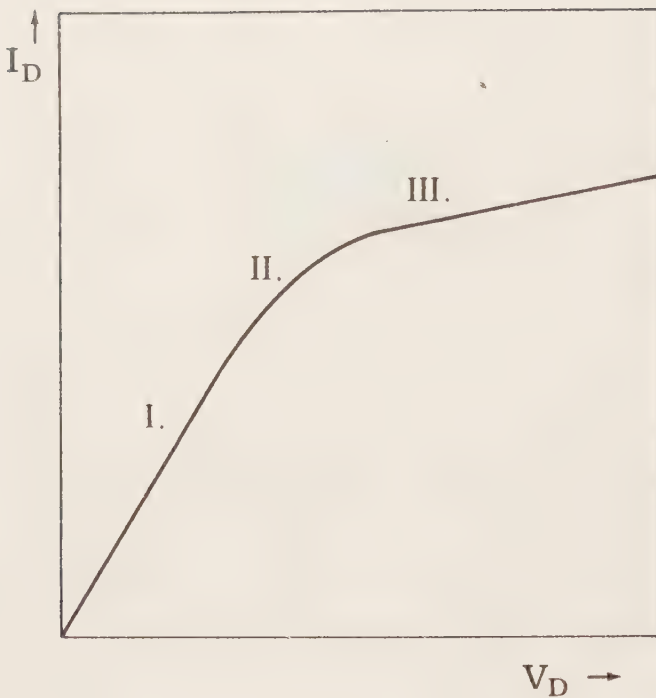
Figure IV.3 - Fonctionnement du M.O.S. en régime saturé.

Le transistor M.O.S. se comporte alors comme une résistance fonction de la tension grille. Si on augmente la polarisation drain, le champ transversal diminue près du drain. En ce cas, l'épaisseur du canal diminue ce qui augmente la résistance entre source et drain. (Figure IV.3). La caractéristique $I_{DS}(V_{DS})$ du transistor met en évidence la variation de la résistance (Figure IV.4).

Si nous continuons à augmenter la tension appliquée à la jonction drain-substrat, la tension drain deviendra égale puis dépassera la tension grille ce qui amènera le transistor en régime saturé. En ce cas le dispositif présente une très forte résistance source-drain due au fait que, près du drain, l'épaisseur du canal devient quasi-nulle (point de pincement) et qu'il se produit entre le point de pincement et le drain un effet nouveau de défocalisation. En effet dans cette zone, le champ transversal change de signe et est dirigé de SiO₂ vers Si, ce qui a pour effet de repousser les trous dans le volume.

Si dans les cas de fonctionnement normal on peut raisonnablement faire une étude unidimensionnelle des phénomènes⁽²⁷⁾, pour la saturation il est indispensable de mener une étude bidimensionnelle. Nous insisterons particulièrement sur ce cas au cours de ce chapitre.

Par ailleurs, dans le cas de structure à canaux très courts, les théories simplifiées ne peuvent plus s'appliquer étant donné la proximité des zones de charge d'espace drain-



- I - Zone résistive
- II - Fonctionnement normal
- III - Fonctionnement saturé

Figure IV.4 - Caractéristique $I_D(V_D)$ d'un transistor M.O.S.

substrat et source-substrat. En ce cas les erreurs commises dans l'étude unidimensionnelle deviennent importantes et l'analyse que nous proposons permet de mieux comprendre le fonctionnement de tels dispositifs et d'expliquer la décroissance de la tension de seuil en fonction de la longueur du canal, par exemple.

Il nous est malheureusement impossible de comparer directement les résultats obtenus avec des résultats expérimentaux (il est en effet impossible de mesurer des concentrations de porteurs libres ou des potentiels électrostatiques dans un dispositif). Aussi nous comparerons les résultats obtenus avec les hypothèses utilisées pour élaborer des modèles simplifiés de transistors M.O.S. dont nous connaissons par ailleurs la parfaite concordance avec les résultats expérimentaux (mesure des courants, des capacités, ...).

IV.2.2 Etude en fonctionnement normal

Nous avons porté sur les figures IV.5 à IV.8 quelques résultats concernant un transistor M.O.S. à canal P en régime normal ($V_G = -5V$ et $V_D = -0,2V$, puis $-1,25V$), la source et le substrat étant tous deux à la masse. Le dispositif représenté a une longueur de canal de 4μ et une profondeur de jonctions source/substrat ou drain/substrat de $1,32\mu$.

Sur la figure IV.5 on a représenté le potentiel dans le dispositif ; on voit que, pour cette très faible polarisation, le potentiel est quasiment indépendant de Y dans tout le canal ce qui va se traduire par une concentration quasi-indépendante de Y et donc un fonctionnement de type résistif.

On vérifie cela sur la figure IV.6 où l'on a tracé la concentration des trous dans le canal. On voit bien que toutes les courbes $P(X)$ à Y donné dans le canal sont quasiment identiques.

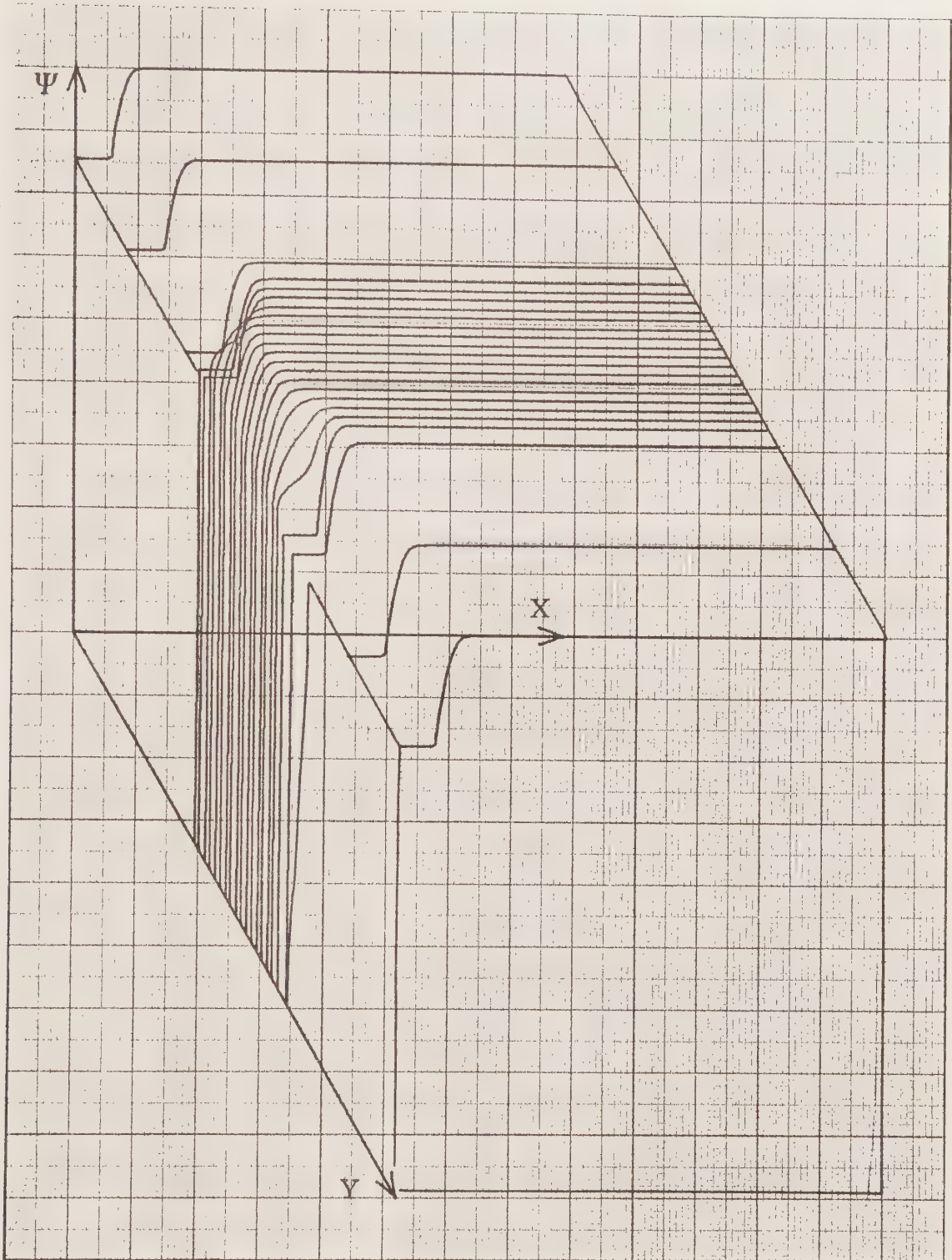


Figure IV.5 - Potentiel dans le dispositif
pour $V_D = -0,2 \text{ V}$ et $V_G = -5 \text{ V}$.

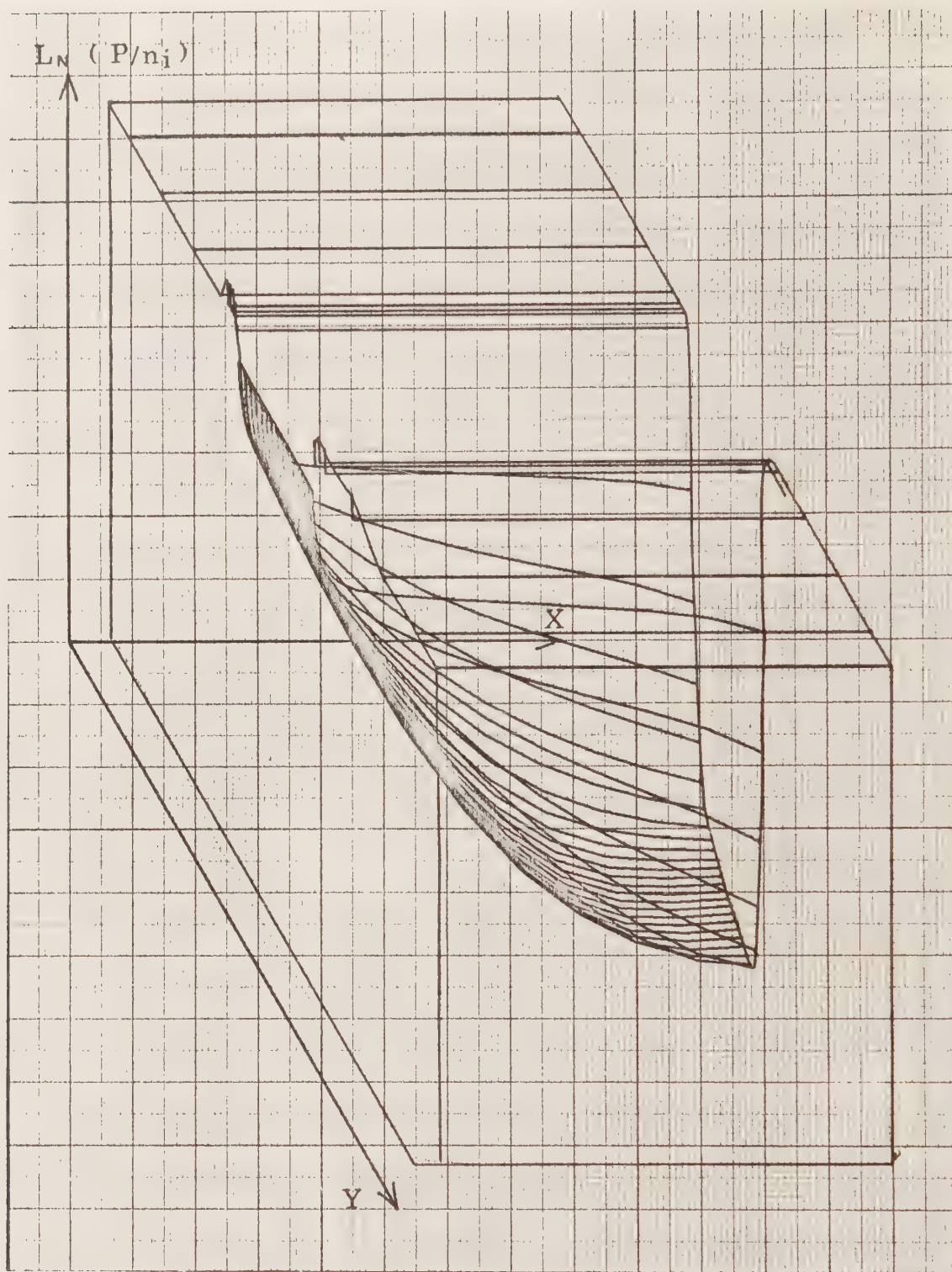


Figure IV.6 - Concentration de trous dans le canal pour $V_D = -0,2 \text{ V}$ et $V_G = -5 \text{ V}$.

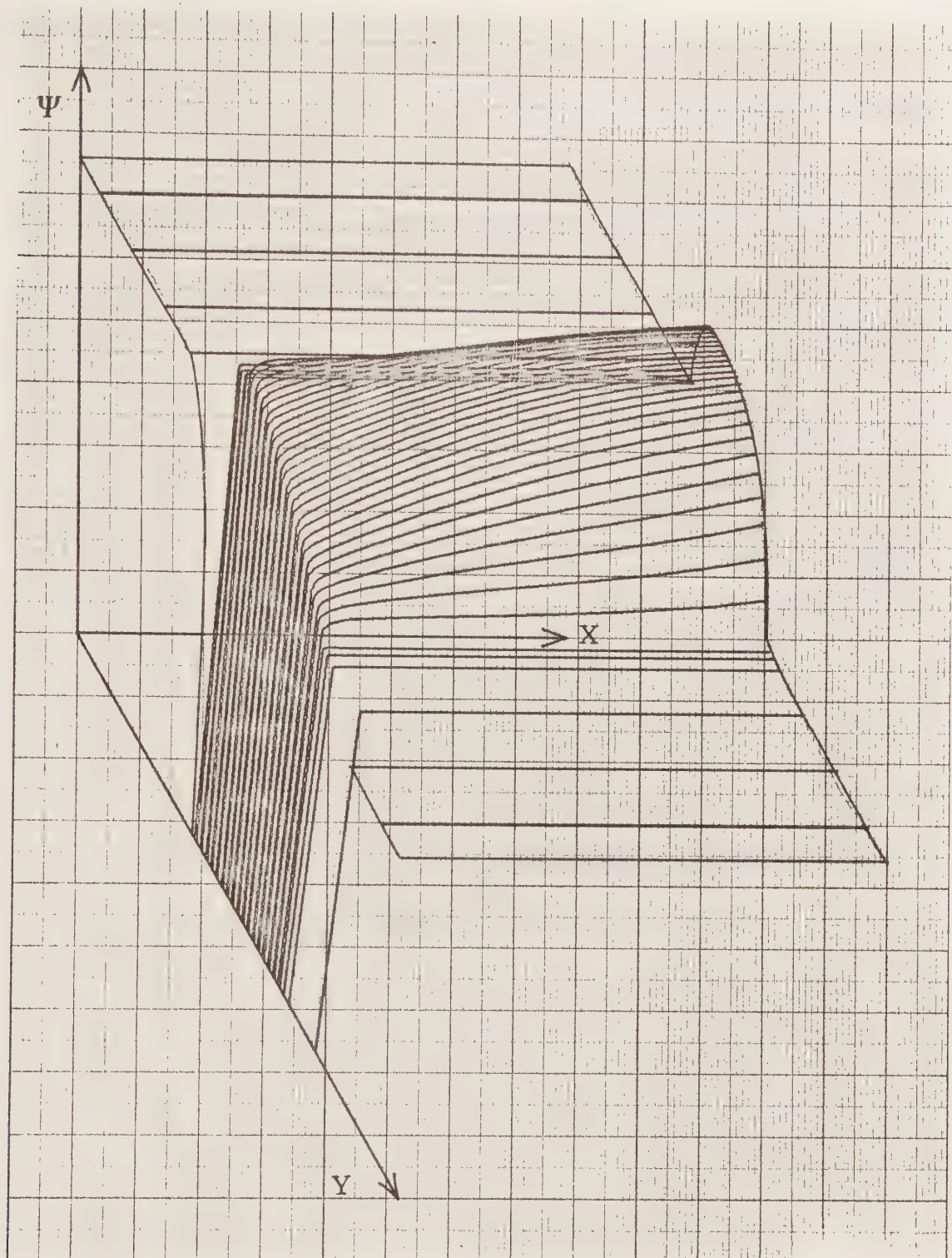


Figure IV.7 - Potentiel dans le canal pour
 $V_D = -1,25 \text{ V}$ et $V_G = -5 \text{ V}$.

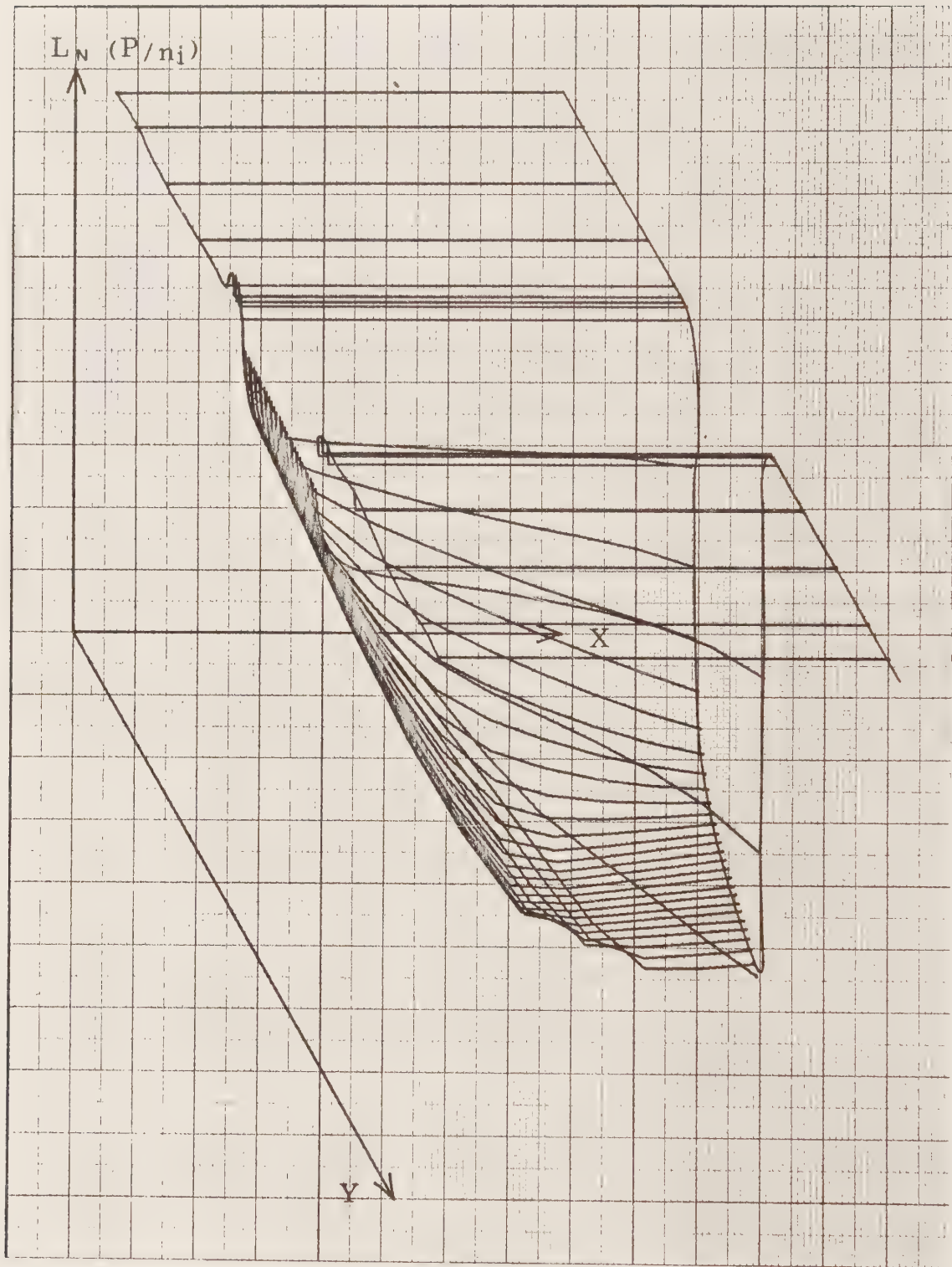


Figure IV.8 - Concentration de trous dans le canal pour $V_D = -1,25$ volts et $V_G = -5$ V.

Sur la figure IV.7 nous avons représenté le potentiel dans le canal pour ce dispositif si l'on prend $V_D = -1,25$ V. On voit cette fois que le potentiel varie de façon sensible dans le canal et l'on observe bien la décroissance du champ électrique à l'interface quand on se déplace de la source vers le drain. La répartition des porteurs n'est plus uniforme le long du canal comme on peut le voir sur la figure IV.8 où l'on remarque, près du drain, que la concentration des trous décroît moins rapidement en fonction de X et que la concentration maximale en P décroît légèrement en fonction de Y entre la source et le drain.

Ces figures rendent bien compte du comportement du dispositif pour ce type de fonctionnement. Sur la figure IV.9 nous avons porté la caractéristique $I_D(V_D)$ (pour $V_G = -5$ V) correspondant à la structure étudiée ainsi que celle calculée à partir d'un schéma équivalent classique (27).

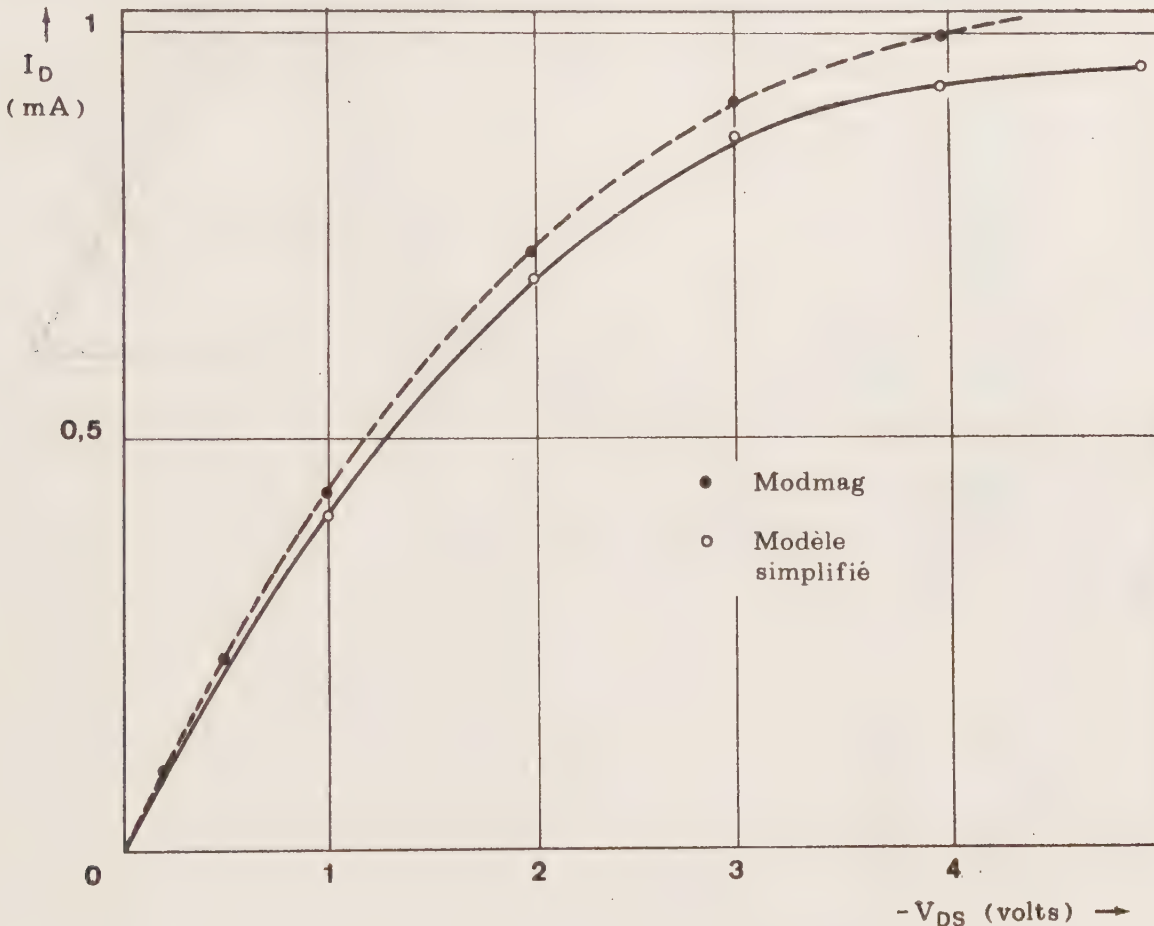


Figure IV.9 - Caractéristique $I_D(V_D)$ du transistor M.O.S.

IV.2.3 Etude en fonctionnement saturé

Nous donnons sur les figures IV.10, IV.11 et IV.12 les répartitions des potentiels et des concentrations en P et N dans un transistor M.O.S. en régime de saturation ($V_{\text{substrat}} = 0$, $V_{\text{drain}} = -6,25$ volts, $V_G = -5$ volts, $V_{\text{source}} = 0$). Le dispositif étudié a une longueur de canal de 4μ et une profondeur de jonctions de $0,132 \mu$ (correspondant à un dispositif réalisé par implantation ionique). On voit parfaitement sur la figure IV.10 la localisation du point de pincement et l'inversion du sens du champ électrique près du drain. On peut

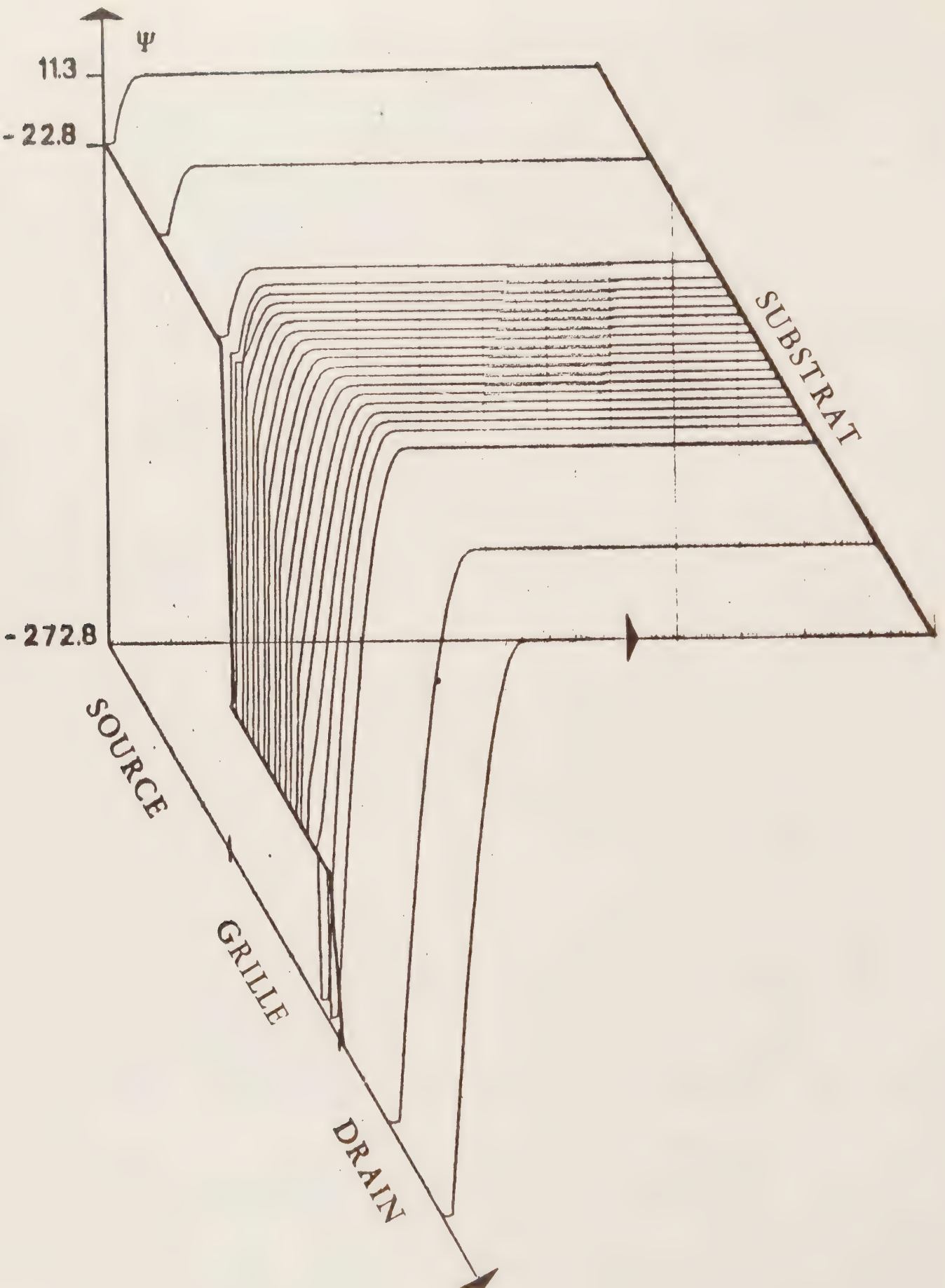


Figure IV.10 - Potentiel dans un M.O.S. en régime saturé.

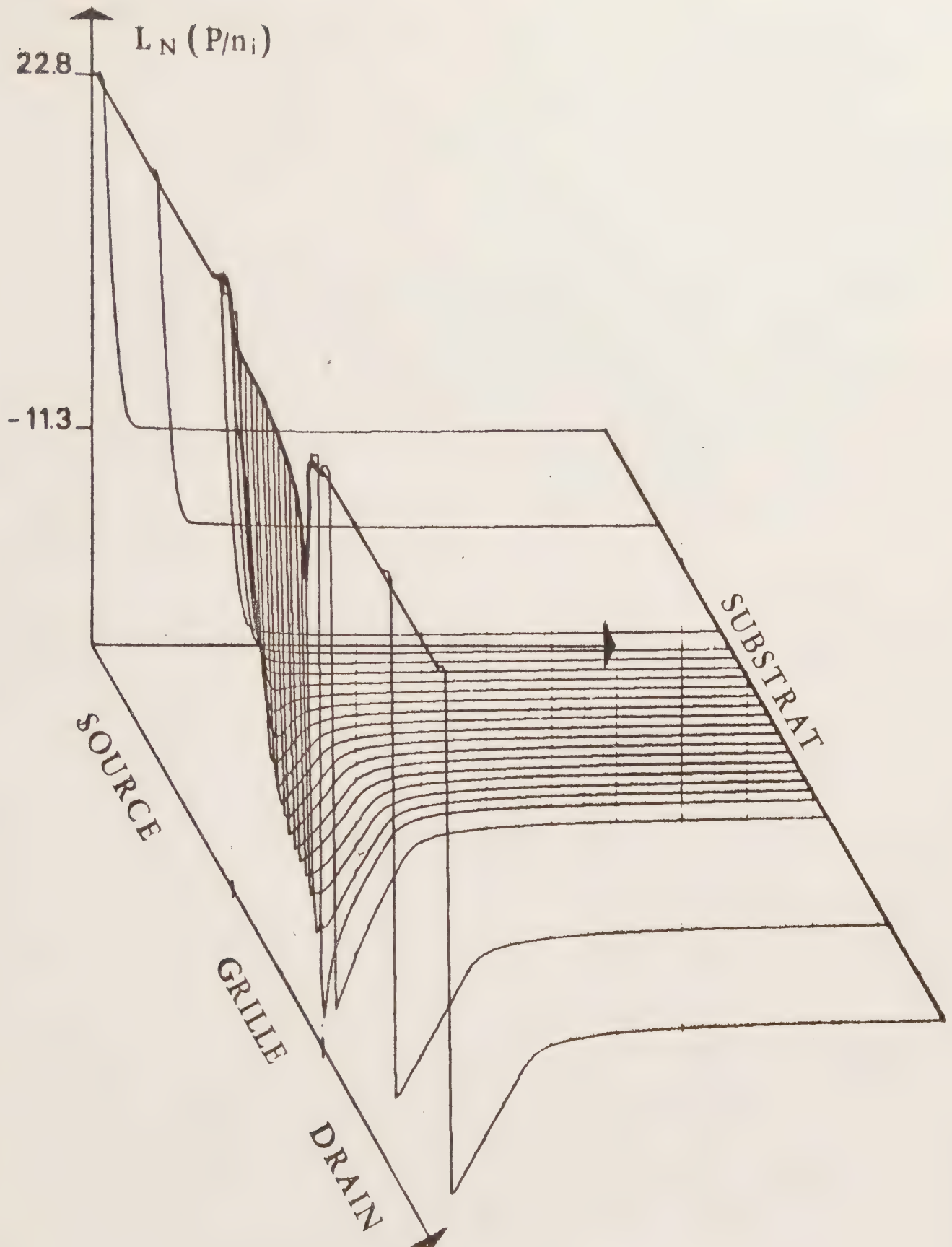


Figure IV.11 - Concentration de trous dans un M.O.S. en régime saturé.

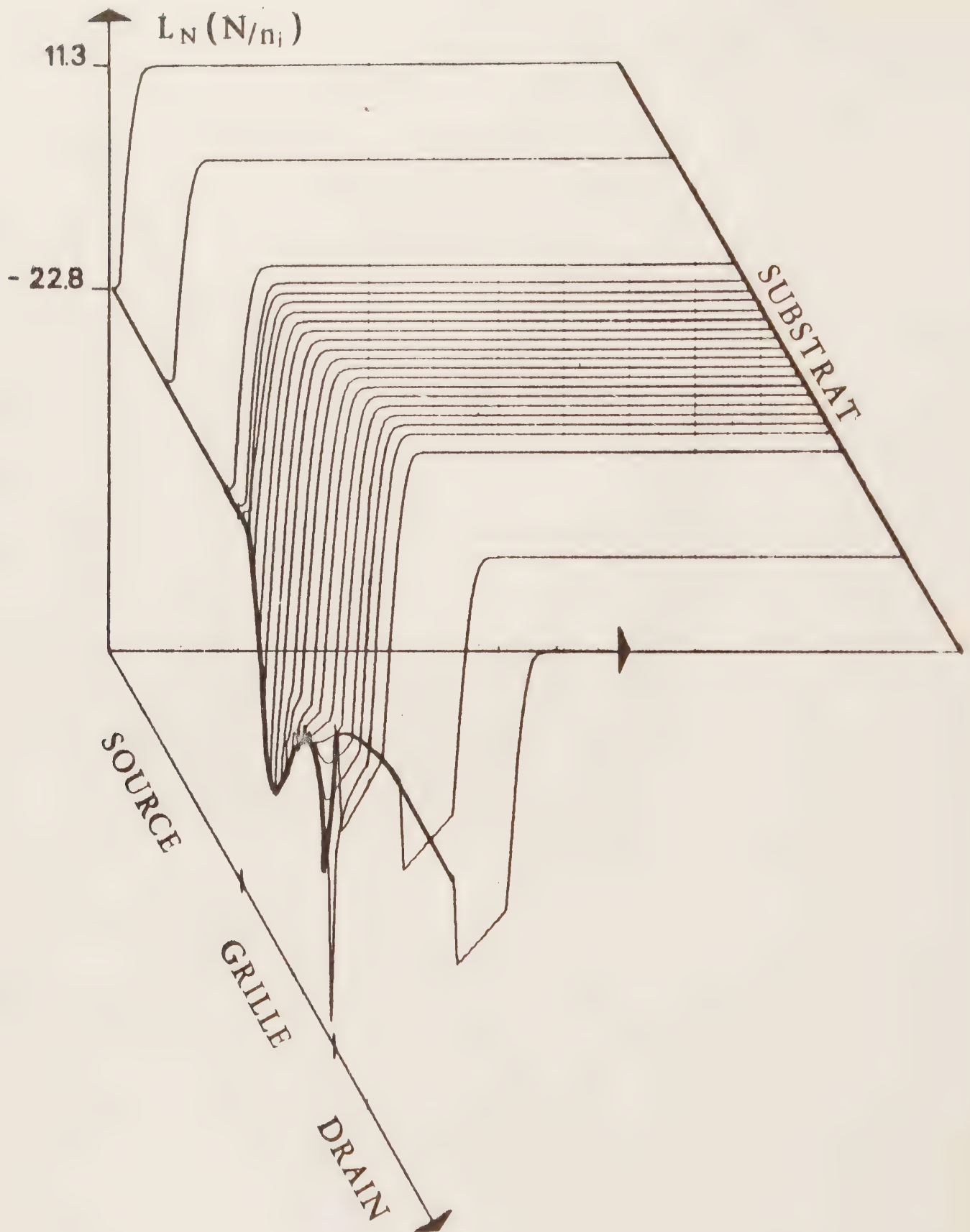


Figure IV.12 - Concentration d'électrons dans un M.O.S. en régime saturé.

localiser également sur cette figure les diverses zones de charge d'espace au voisinage de l'interface et autour des deux jonctions P N.

On a porté sur la figure IV.11 la concentration en trous dans le dispositif. On peut remarquer sur cette figure deux particularités importantes :

- un accroissement de la concentration en trous au voisinage de l'interface Si / Si O₂ dans la source. Cet effet est dû à l'action de la grille située en face de la diffusion P qui attire des trous à la surface.
- Un affaiblissement plus important de la concentration des trous dans le canal au voisinage du drain dans une région limitée. Cet effet met en évidence la défocalisation. Nous y reviendrons ultérieurement.

Sur la figure IV.12 représentant la concentration des électrons dans le dispositif, nous remarquons la forte décroissance de la concentration dans le canal, ce qui permet de le localiser avec précision. On remarque également, au voisinage du drain, une augmentation de la concentration des électrons à l'interface. Cet effet se produit entre le point de pincement et le drain comme on pouvait le prévoir par une analyse qualitative des phénomènes. Dans tous les cas, cette concentration reste négligeable devant celle des trous.

Ces trois figures expliquent donc bien qualitativement le fonctionnement du dispositif. Afin d'effectuer une comparaison quantitative de nos résultats, nous allons maintenant les comparer avec les hypothèses d'un modèle évolué de fonctionnement du M.O.S. à saturation (26).

IV.2.3.1 Modèle avec hypothèse de vitesse limite

On étudie le phénomène en admettant les deux hypothèses suivantes :

- les porteurs atteignent la vitesse limite V_L en un point voisin du drain (point de pincement),
- les porteurs injectés après le point de pincement sont défocalisés par le champ de surface et repoussés dans le volume. Ils sont collectés par le drain sur la profondeur de la jonction drain-substrat, soit x_j .

Nous admettons que cette défocalisation a pour effet de répartir les porteurs de façon homogène sur une profondeur variant linéairement en fonction de la distance par rapport au drain (hypothèse triangulaire, fig. IV.13). Sous ces hypothèses, il est possible d'intégrer l'équation de Poisson ce qui permet d'obtenir une relation entre courant et polarisation

$$\left| V_D - V_{DSS} \right| = \frac{q N_D \epsilon^2}{2 \epsilon_o \epsilon_{si}} \left(1 + \frac{2 I x_j}{V_L q N_D Z (x_j - d)^2} \left(\log \frac{x_j}{d} - 1 + \frac{d}{x_j} \right) + \epsilon E_c \right) \quad (IV.1)$$

où

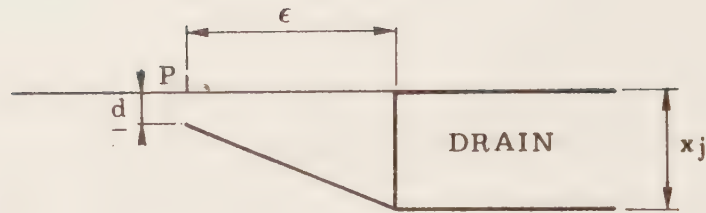
V_L : vitesse limite des porteurs

E_c : champ critique correspondant à la vitesse limite

d : épaisseur de la couche d'inversion

x_j : profondeur du drain

ϵ : extension de la zone de charge d'espace drain-canal.



P : point de pincement

Figure IV.13 - Modèle triangulaire

Cette approximation fournit une très bonne concordance avec les résultats expérimentaux et nous l'avons prise pour base de comparaison.

IV.2.3.2 Effets de défocalisation

Nous donnons sur la figure IV.14 les concentrations en trous et électrons sur la surface entre source et drain pour un dispositif dont les caractéristiques technologiques sont les suivantes :

- longueur de canal : 10μ
- profondeur de jonction : $1,32 \mu$

Le dispositif est soumis aux polarisations suivantes :

$$V_G = -5 \text{ volts} \quad V_D = -6,25 \text{ volts} \quad V_S = V_B = 0$$

On remarque nettement sur ces courbes l'accroissement de concentrations des électrons au voisinage du point de pincement ainsi que l'affaiblissement correspondant de la concentration en trous.

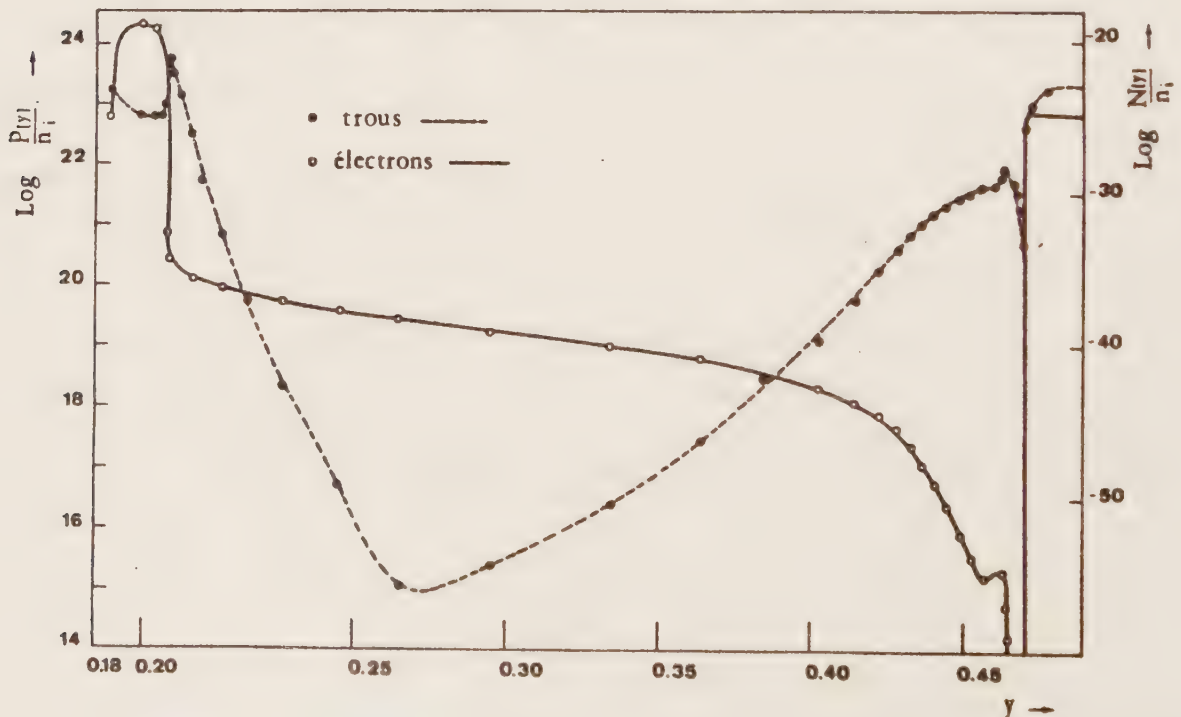


Figure IV.14 - Concentration des porteurs à l'interface.

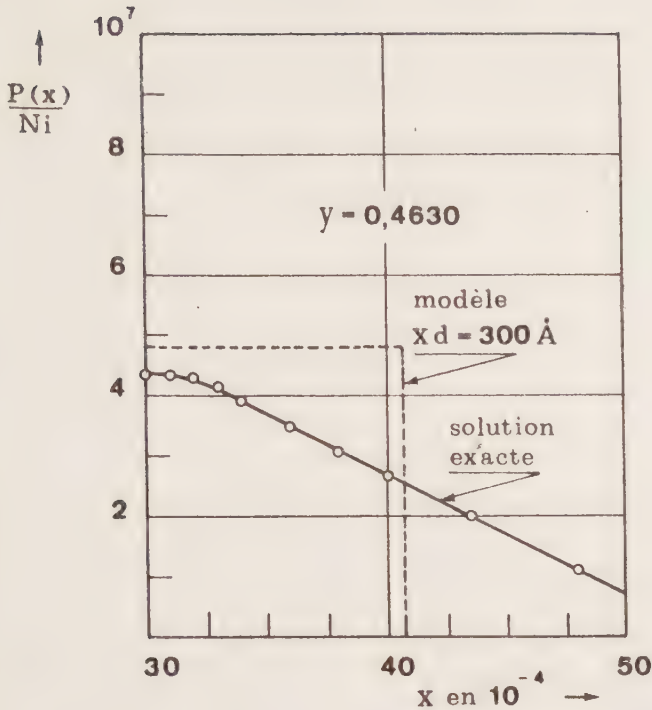


Figure IV.15 - Densité des trous dans le canal entre pincement et drain.

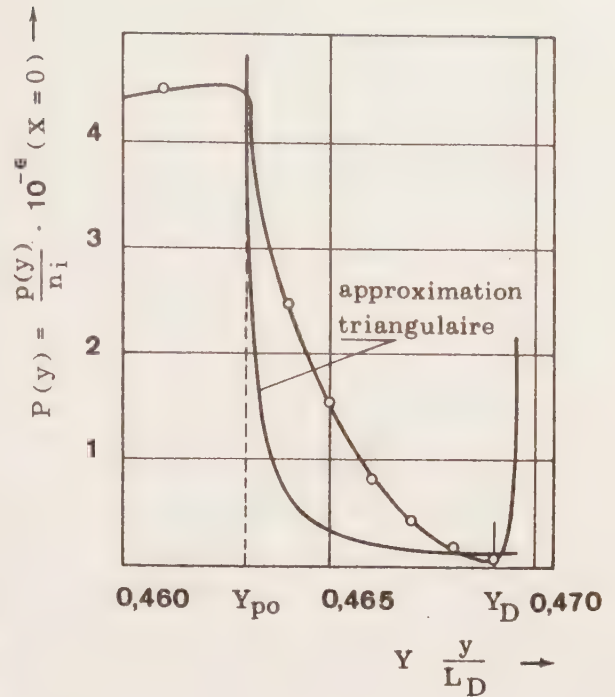


Figure IV.16 - Densité des trous à l'interface entre pincement et drain.

Sur la figure IV.15, nous avons tracé la densité des trous en fonction de X près du point de pincement. La solution approchée, hypothèse de l'approximation triangulaire, a été tracée sur cette même figure en prenant une profondeur de canal de $300 \text{ \AA}$. Cette valeur est nettement plus élevée qu'au voisinage de la source, en raison de l'affaiblissement du champ normal dans l'oxyde et de la diffusion des porteurs vers le substrat qui se produit en cette région. On peut remarquer qu'avec ces hypothèses, on obtient deux répartitions très voisines de la concentration en trous en surface dans la zone qui nous intéresse. L'intégrale de la concentration des porteurs en X , dans la profondeur du canal nous permet de déterminer les paramètres du modèle de répartition simplifié.

Sur la figure IV.16, nous avons tracé la concentration des porteurs entre le point de pincement et le drain, ainsi que la valeur de cette concentration dans l'approximation triangulaire, calculée à partir de l'épaisseur de $300 \text{ \AA}$ obtenue précédemment. Nous obtenons une concordance entre les deux résultats, au moins qualitativement. En fait les résultats calculés l'ont été en supposant que la mobilité des porteurs était indépendante du champ électrique, ce qui entraîne une vitesse plus grande des porteurs et donc une tendance moindre à la défocalisation, d'où une décroissance de la concentration plus faible qu'elle n'est en réalité. Cette explication est parfaitement justifiée par les résultats que nous avons obtenus en tenant compte de la variation de la mobilité en fonction des champs par la loi simplifiée suivante :

$$\mu = \mu_0 \cdot \frac{1}{1 + \alpha |E_N| + \beta |E_T|} \quad (\text{IV.2})$$

où E_N et E_T sont les champs normaux et transverses dans le canal, α et β deux constantes fonctions de la technologie et de la géométrie du dispositif.

IV.2.3.3 Répartition du potentiel le long du canal

Sur la figure IV.17 nous avons porté la répartition du potentiel en surface pour des longueurs de canal de 4 et 10 μ , le dispositif étant dans les deux cas soumis aux polarisations de $V_D = -6,25$ V, $V_G = -5$ V, $V_B = V_S = 0$. L'épaisseur de l'oxyde est de 1000 Å.

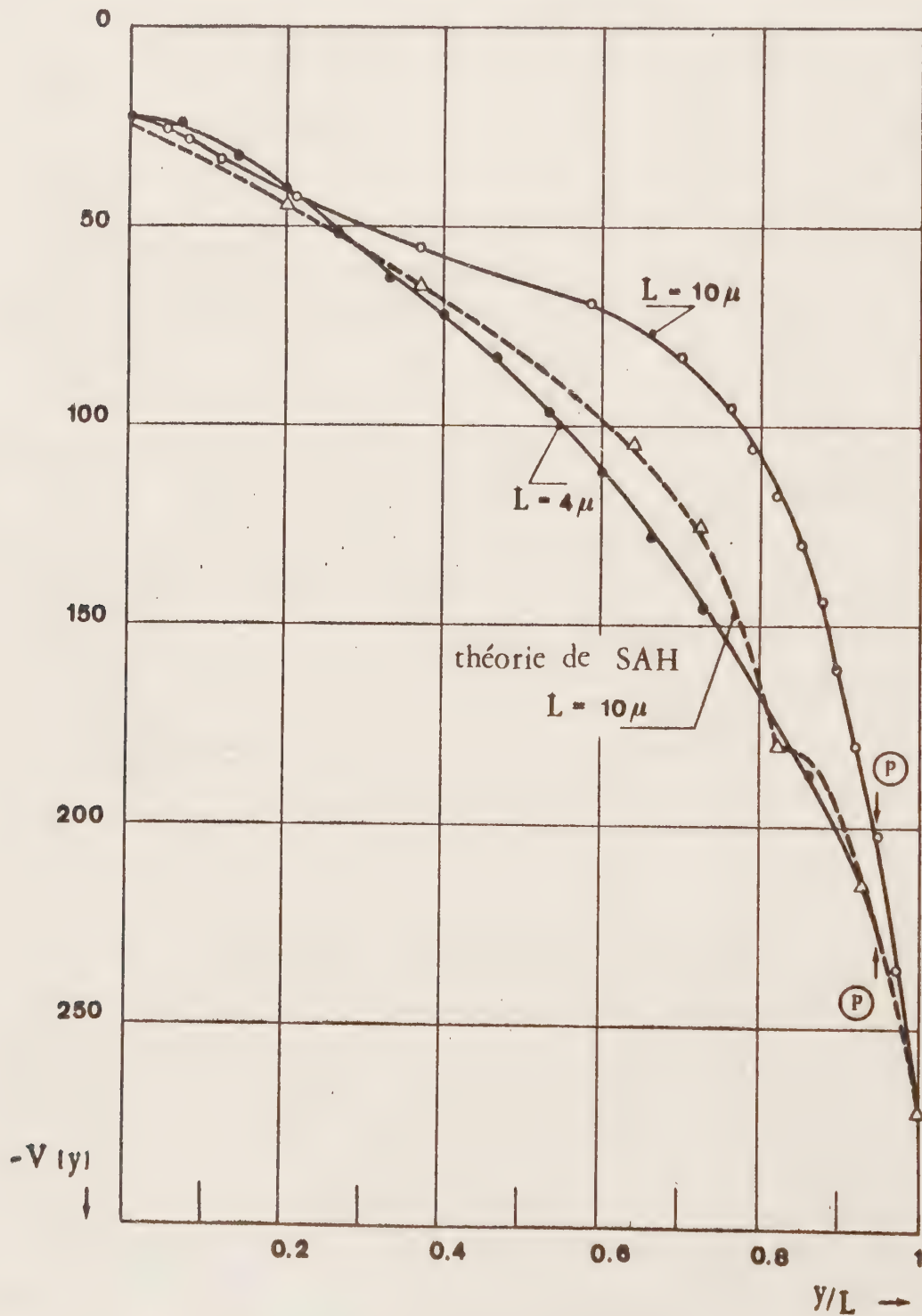


Figure IV.17 - Potentiel à l'interface

A titre de comparaison, nous avons tracé la répartition du potentiel calculée à partir de la théorie de Reddi et Sah ⁽⁴⁰⁾ pour une longueur de canal de 10μ . Nous avons tracé cette figure en variable normalisée y/L où L est la longueur de canal.

On remarque donc que la répartition du potentiel en surface varie sensiblement en fonction de la longueur de canal, contrairement à ce que laissaient supposer les premiers travaux de Sah sur le M.O.S. Par contre les résultats obtenus sont en bonne concordance avec le modèle basé sur l'approximation triangulaire et, en particulier, le point de pincement P est à peu près à la même abscisse pour les deux longueurs de canal considérées; il est situé beaucoup plus près du drain que ne le prévoit la théorie simplifiée ⁽⁴⁰⁾.

D'après les résultats portés sur cette figure, nous avons calculé la valeur du champ au point de pincement, soit de l'ordre de $2,5 V/\mu$. Cette valeur est très proche du champ critique de $3 V/\mu$ ce qui montre bien la nécessité de tenir compte du champ électrique sur la mobilité, ce qui n'était pas le cas sur l'exemple traité. Cependant la bonne concordance des résultats, quant à la répartition du potentiel, montre bien que cette hypothèse n'est pas trop restrictive (le champ restant limité à des valeurs raisonnables). Il faut d'ailleurs souligner que les divers modèles simplifiés, en général, ne tiennent pas compte de ces phénomènes; les résultats obtenus en utilisant la loi IV.2 de variation de la mobilité diffèrent relativement peu des résultats précédents.

IV.2.4 Etude au voisinage de la source

Afin d'étudier la variation du champ d'injection au voisinage de la source, nous avons tracé, sur la figure IV.18, la répartition du potentiel pour divers dispositifs et pour diverses polarisations substrat. On peut remarquer que le champ d'injection augmente quand la longueur du canal diminue, comme l'indique une étude simplifiée unidimensionnelle ⁽²⁷⁾. Le même phénomène se produit quand x_j augmente (il semble cependant que la forme de dopage utilisée modifie cet effet qui est lié au champ maximum dans la zone de charge d'espace). Le deuxième effet est aussi mis en évidence sur la figure IV.18. On note également la très faible influence de la polarisation du substrat, surtout pour les structures à canal court. Par contre, pour les structures à canal long, cette influence est beaucoup plus sensible et le champ d'injection décroît quand on augmente la polarisation du substrat. Ces divers effets sont en accord avec les résultats expérimentaux obtenus sur de telles structures.

IV.2.5 Etude du perçage

Dans les cas de structures à canal très court, on montre ⁽⁴¹⁾ que le courant de perçage peut intervenir dans le courant source-drain. Il est très difficile de distinguer les contributions respectives des deux effets. Sans vouloir étudier ce problème actuellement, nous donnons sur les figures IV.19 et IV.20 la répartition du potentiel et de la concentration de trous pour un dispositif à canal très court (moins de 2μ) de profondeur de jonction $1,32 \mu$ soumis aux tensions $V_S = V_B = 0$, $V_D = -6,25 V$, $V_G = +1 V$.

On voit nettement sur ces figures la formation d'une région dans laquelle la circulation des trous sera possible. On peut remarquer que la polarisation de la grille, en ce

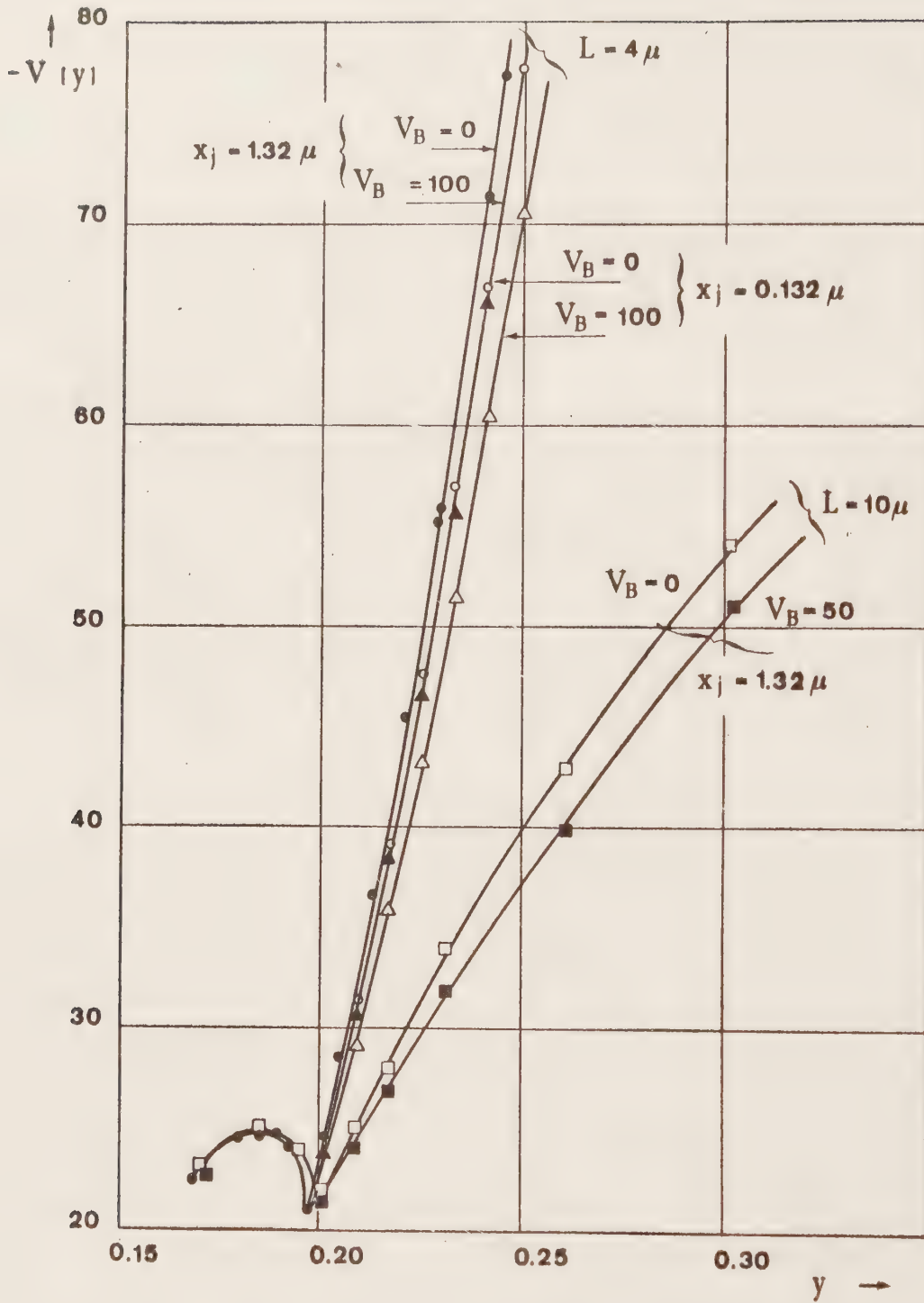


Figure IV.18 - Potentiel au voisinage de la source.

cas, est positive et que la circulation des trous se fait dans le volume, ce qui distingue bien cet exemple des cas traités précédemment où le passage des porteurs se fait exclusivement en surface. En outre la forme des surfaces sera à peu près indépendante de la polarisation grille (à condition bien sûr qu'elle soit positive ; à défaut, nous superposerions l'effet de conduction normale à celui de perçage). On remarque que l'épaisseur de la zone conductrice est de l'ordre de la profondeur des jonctions.

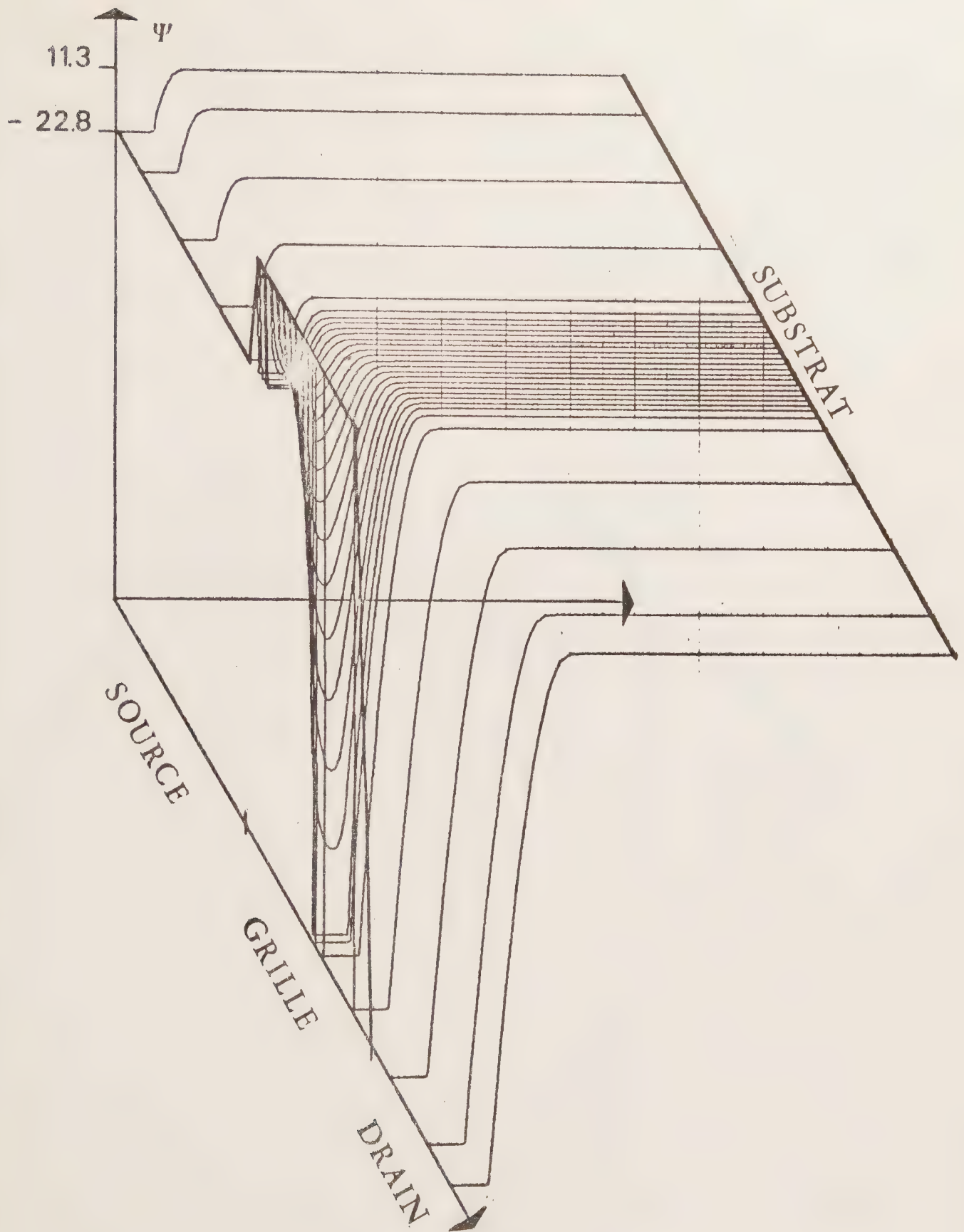


Figure IV.19 - Effet de perçage : potentiel dans le dispositif.

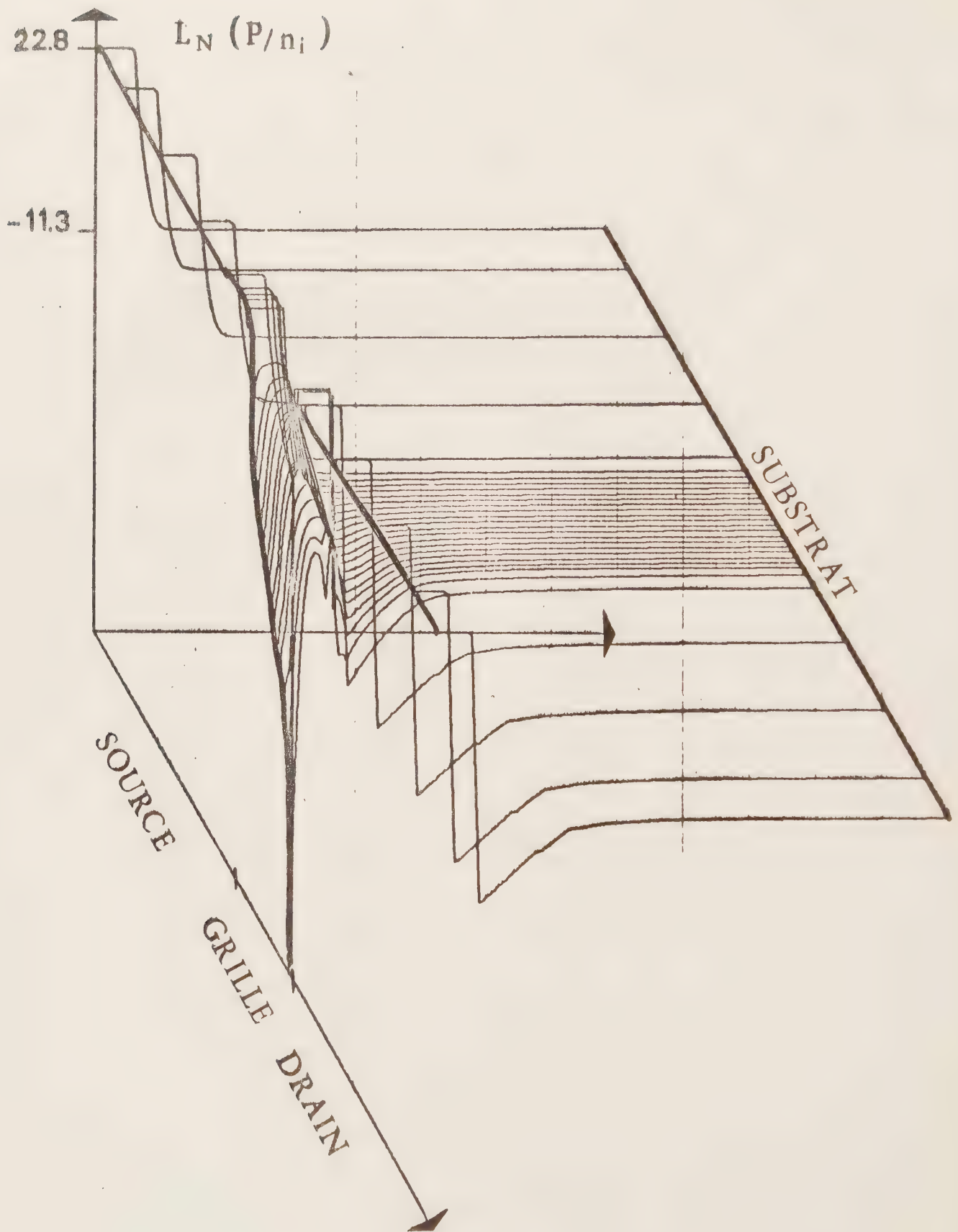


Figure IV.20 - Effet de perçage : concentrations des trous dans le dispositif.

IV.3 ETUDE BIDIMENSIONNELLE DU TRANSISTOR BIPOLAIRE

Nous allons dans cette partie étudier essentiellement les effets bidimensionnels se produisant dans un transistor bipolaire. Les effets de volume sont en effet correctement pris en compte par le modèle unidimensionnel et ont déjà été analysés plus particulièrement ⁽⁵¹⁾.

La figure IV.21 donne une vue de la structure étudiée : un transistor NPN dans lequel on fixe le potentiel en surface des régions recouvertes de SiO_2 par les grilles G_1 et G_2 . On remarquera le contact collecteur à droite du dispositif. Cette façon de faire nous permet de simuler correctement une couche N^+ enterrée. Le dopage utilisé dans les exemples traités est représenté sur la figure IV.22. Il s'agit d'un transistor à jonctions quasi abruptes. La variation du dopage entre deux régions voisines est linéaire. Tout autre dispositif serait bien évidemment traité de façon similaire.

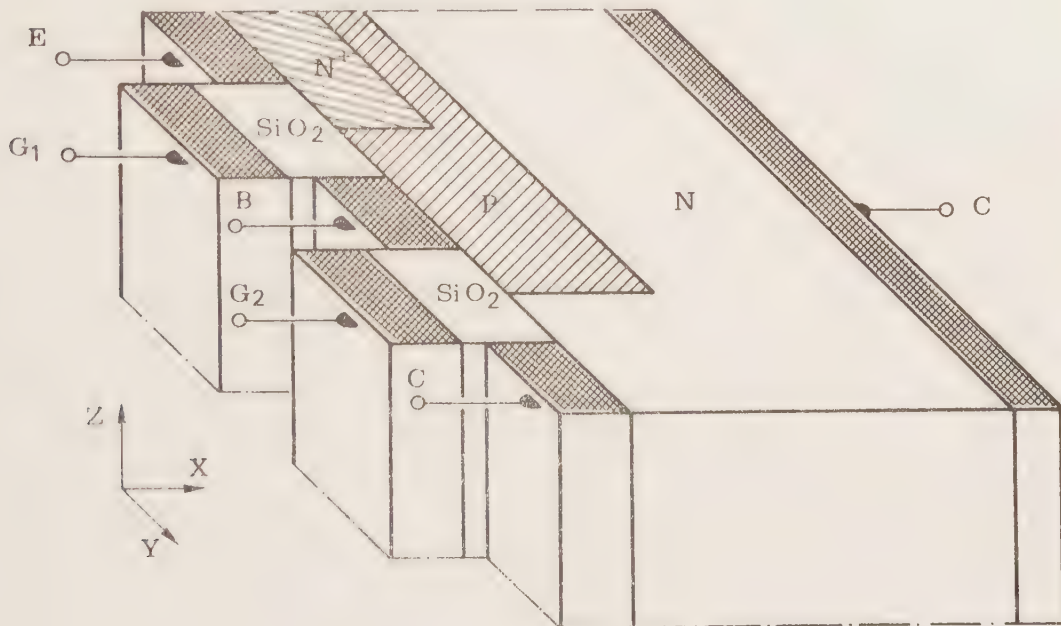


Figure IV.21 - Structure géométrique du transistor bipolaire

IV.3.1 Etude du potentiel

Nous avons porté sur la figure IV.23 la répartition du potentiel dans le transistor pour une polarisation émetteur base de $0,8 \text{ V}$ correspondant à un cas de forte injection. On remarque sur cette figure une variation rapide du potentiel dans les couches d'oxyde due à la présence des grilles de contrôle, ce qui se traduira par une variation des concentrations des porteurs libres. Cet effet est cependant très localisé (de l'ordre de $10 \text{ \AA}$ dans le silicium). En effet l'épaisseur d'oxyde a été volontairement prise très élevée (1μ) pour ne pas introduire d'effets parasites par trop importants.

On notera sur la figure IV.23 une variation notable du potentiel dans le collecteur en face de la zone active du transistor. Cet effet est dû à la chute ohmique provoquée par le passage d'un courant élevé dans cette zone; par contre hors de la zone frontale du transistor, le

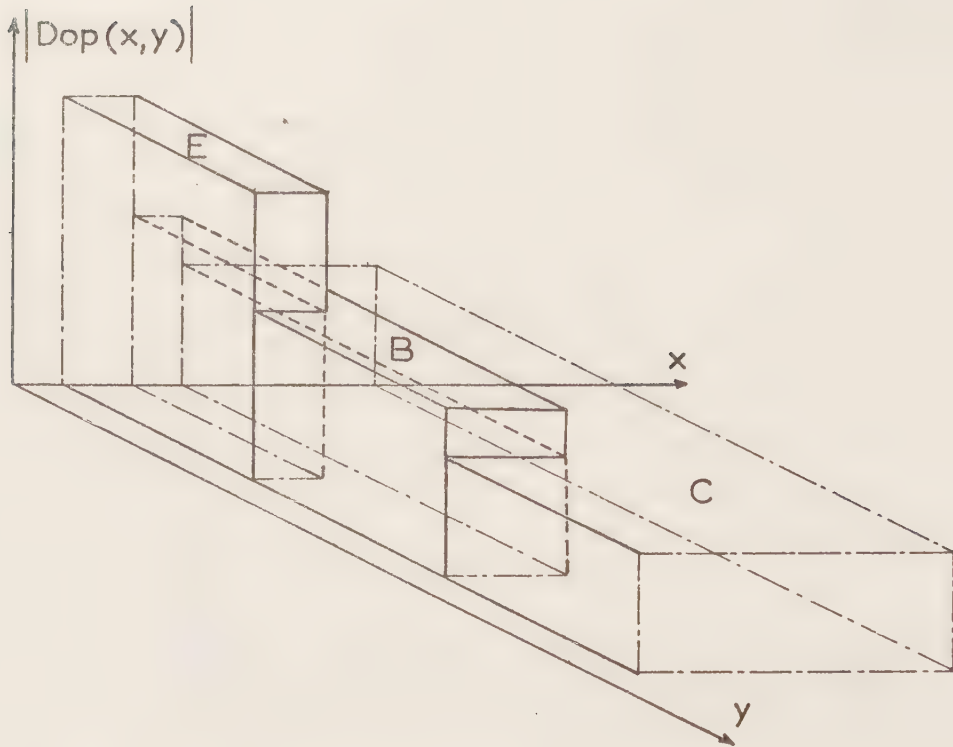


Figure IV.22 - Profil de dopage du transistor

collecteur est quasiment équipotentiel. On remarquera aussi la variation de l'épaisseur de la zone de charge d'espace collecteur base due au courant (densité de courant de l'ordre de 1000 A/cm^2). On voit également sur cette figure la chute de potentiel dans la base due à la circulation du courant base.

IV.3.2 Injection latérale et modulation de l'épaisseur de base

Nous avons porté sur la figure IV.24 la concentration d'électrons libres pour un cas de faible injection (densité de courant de l'ordre de 10^{-6} A/cm^2 , $V_{EB} = 0,2 \text{ volt}$). On voit sur cette figure apparaître une faible injection latérale puis la concentration des électrons décroît en fonction de y dans la base et atteint sa valeur d'équilibre devant le contact métallique. On remarque en cette zone le léger enrichissement en surface dû à la grille de contrôle. Après le contact base, on aura enrichissement dans la zone de base, puis appauvrissement dans la zone collecteur.

Sur la figure IV.25 on a porté la concentration en électrons pour une injection forte (densité de courant de l'ordre de 1000 A/cm^2 , $V_{EB} = 0,8 \text{ volt}$). On note cette fois une forte injection latérale qui se propage jusqu'à la zone de charge d'espace base collecteur. La présence du contact métallique de base affecte assez peu la concentration d'électrons libres dans le volume, malgré l'hypothèse de vitesse de recombinaison infinie sur le contact que nous avons prise. Les effets de surface dus aux grilles de contrôle sont cette fois plus importants mais la perturbation apportée par ces électrodes n'est sensible que sur une épaisseur très faible (de l'ordre de $10 \text{ \AA}$).

Nous donnons enfin (figure IV.26) la répartition des porteurs dans un cas de très forte injection (densité de courant de l'ordre de 3000 A/cm^2 , $V_{EB} = 0,95 \text{ V}$).

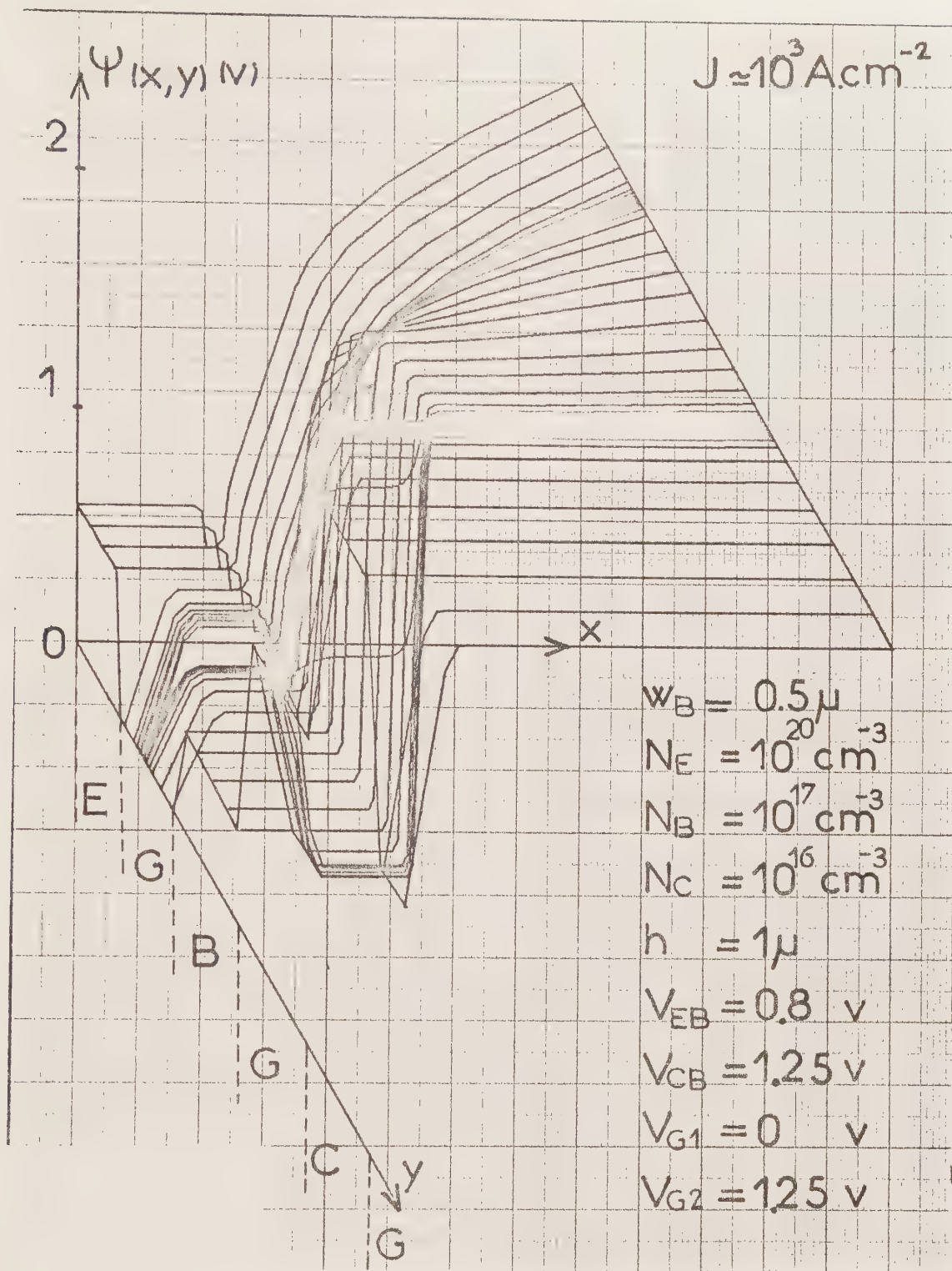


Figure IV.23 - Potentiel électrostatique dans le transistor NPN

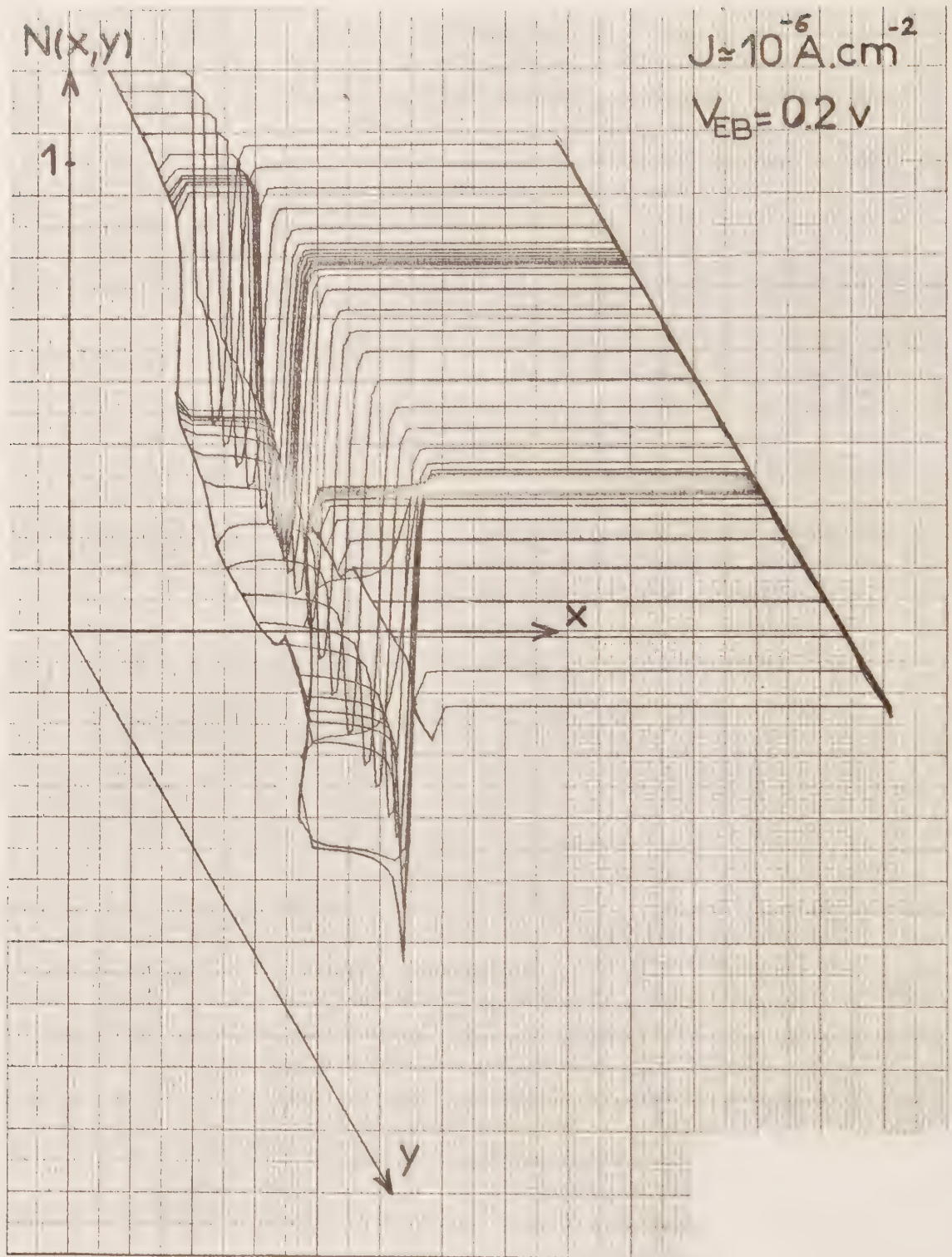


Figure IV.24 - Concentration d'électrons (faible injection).

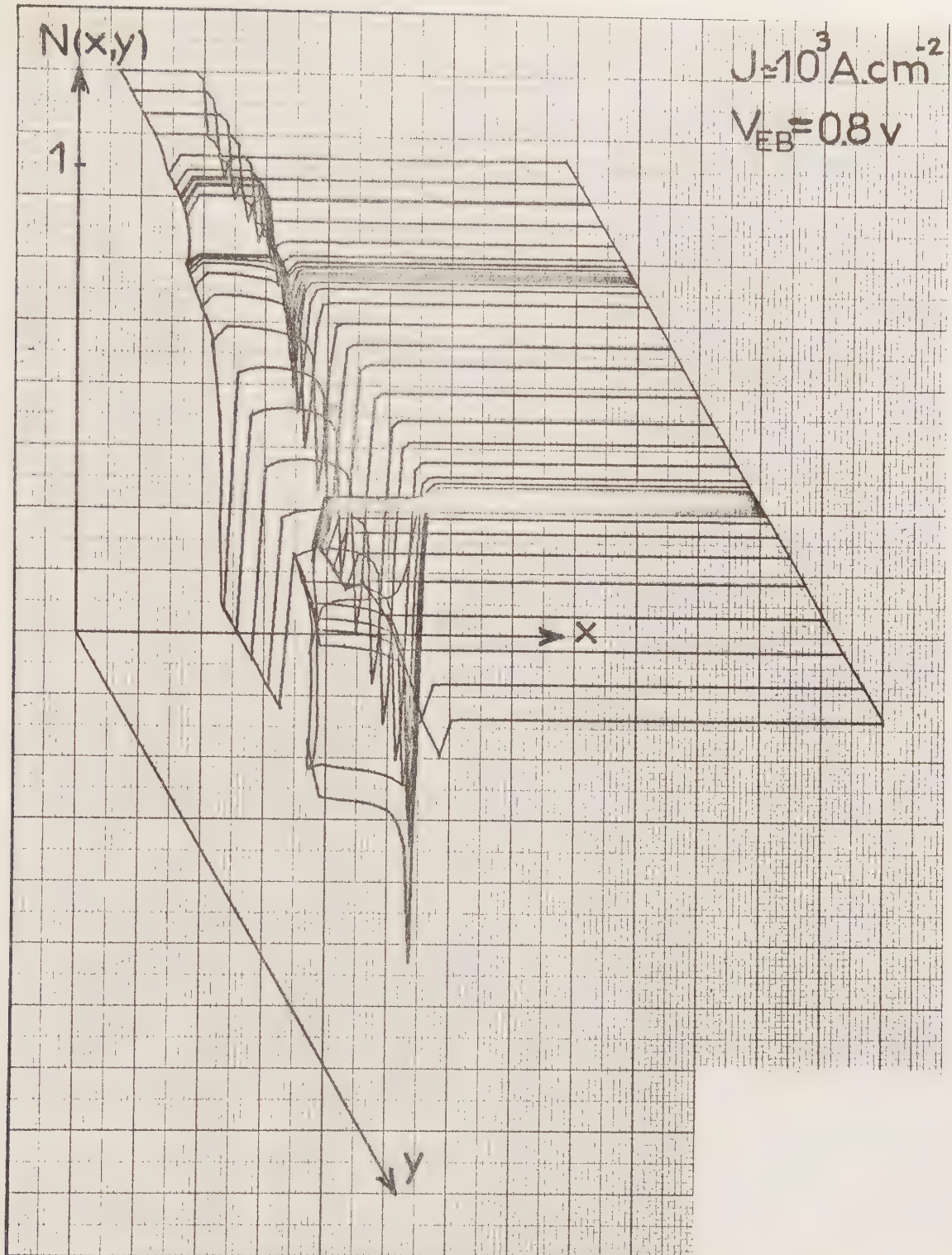


Figure IV.25 - Concentration d'électrons (forte injection).

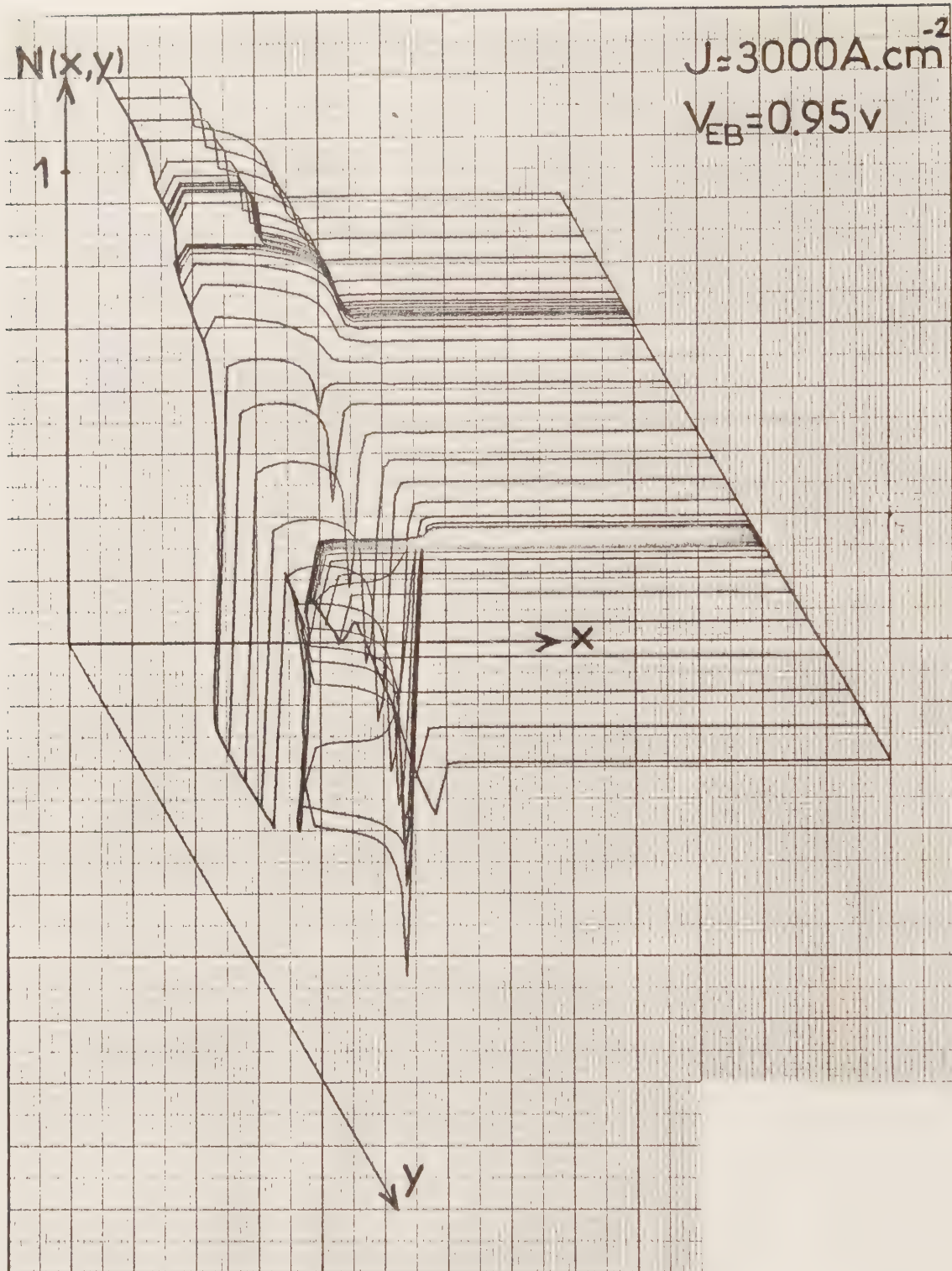


Figure IV.26 - Concentration d'électrons
(très forte injection).

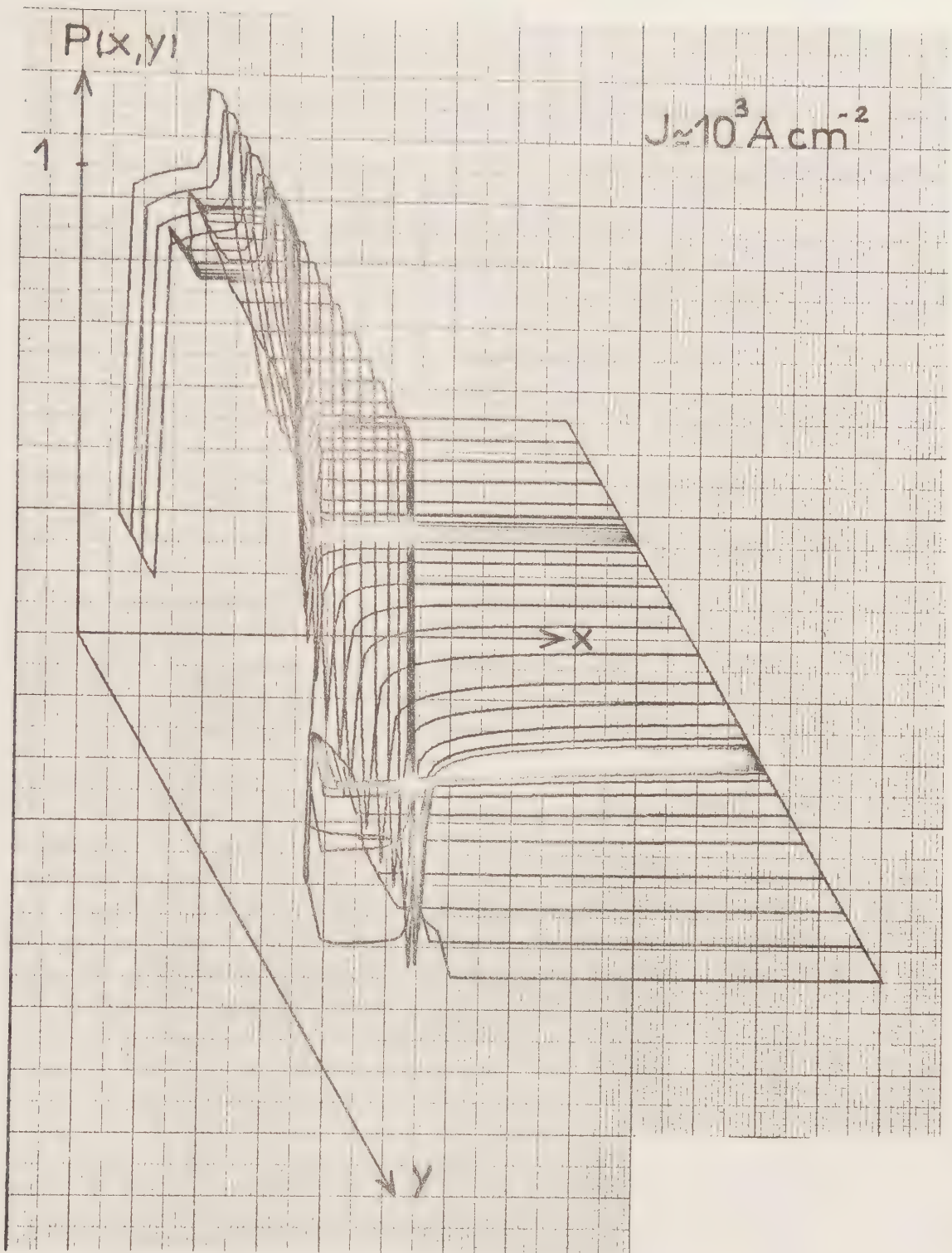
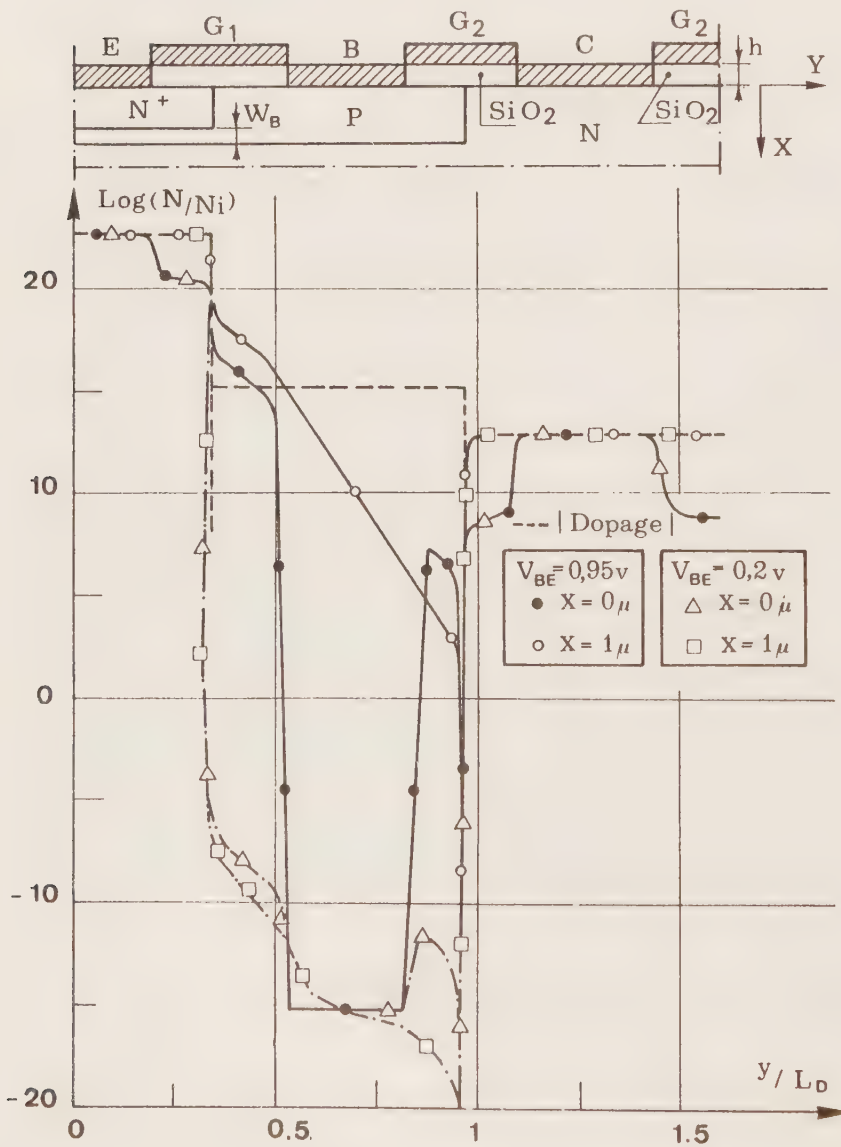


Figure IV.27 - Concentration de trous
(forte injection).

On remarque sur cette dernière figure la disparition totale de la déplétion pour les électrons entre base et collecteur dans la zone frontale du transistor. Ce dernier tracé met aussi en évidence une injection très importante dans la zone latérale du transistor, cette injection latérale augmente sensiblement la charge stockée dans le dispositif comme nous le verrons ci-dessous.

Nous avons porté sur la figure IV.27 la concentration des trous pour $V_{EB} = 0,8$ volt (courant de l'ordre de 10^3 A/cm²). On remarquera sur cette figure qu'il y a un accroissement important de la concentration de trous dans l'émetteur, due à la jonction émetteur base fortement polarisée en direct.

Ces figures permettent de mettre en évidence la variation de l'épaisseur effective de la base pour diverses injections, par rapport à son épaisseur géométrique.



$$h = 1 \mu$$

$$W_B = 0.5 \mu$$

$$N_E = 10^{20} \text{ at/cm}^3$$

$$N_B = 6 \cdot 10^{16} \text{ at/cm}^3$$

$$N_C = 6 \cdot 10^{15} \text{ at/cm}^3$$

$$V_{CE} = 2.5 \text{ V}$$

$$V_{G1} = 0 \text{ V}$$

$$V_{G2} = 1,25 \text{ V}$$

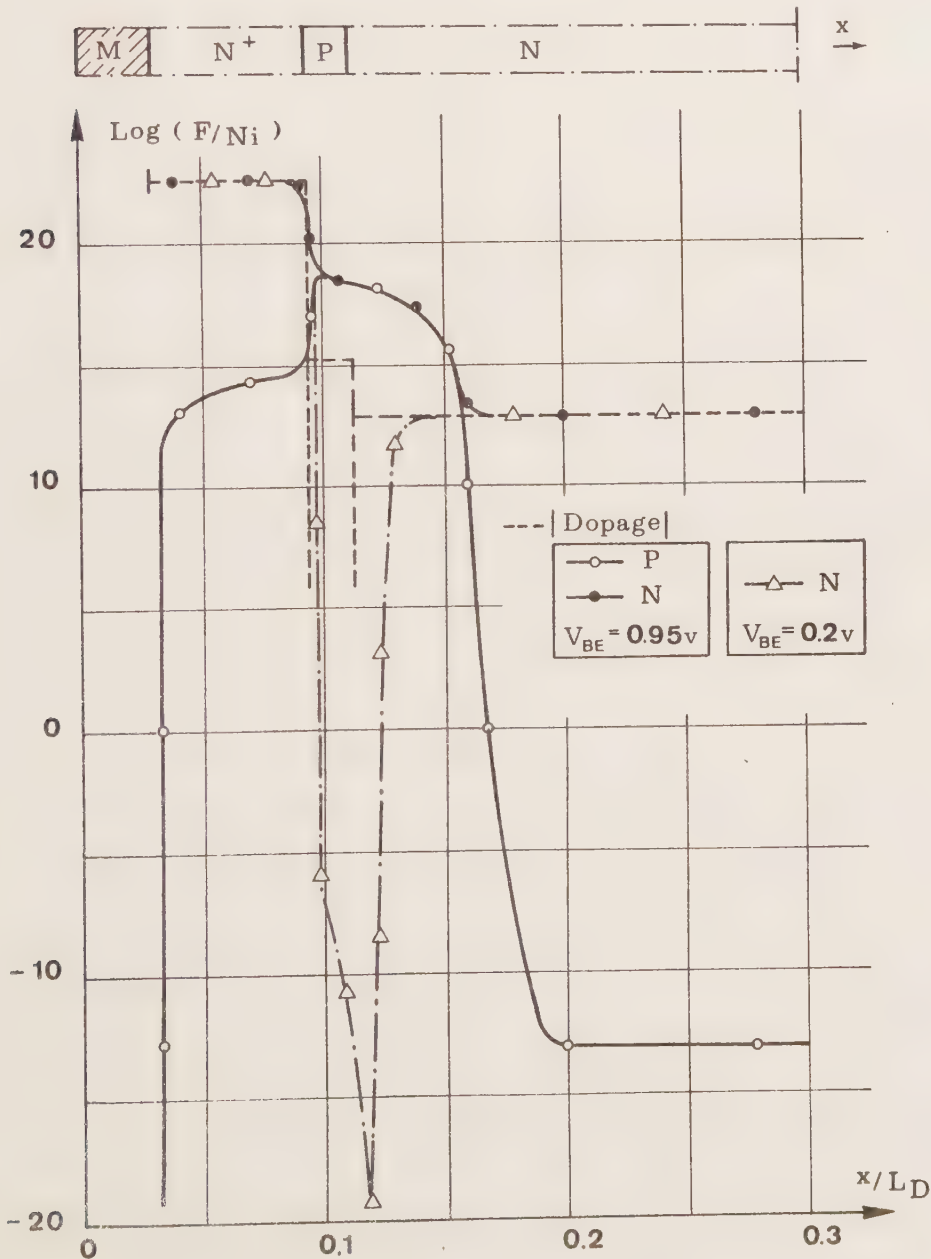
$$L_D = 33 \mu$$

Figure IV.28 - Concentration d'électrons dans la base latérale.

IV.3.3 Etude de la charge stockée

Afin de pouvoir étudier plus précisément la valeur de la charge stockée dans le dispositif, nous avons tracé sur la figure IV.28 la concentration des électrons sur l'interface Si Si O₂ et à une abscisse $X = 1 \mu$ correspondant à la moitié de la profondeur de l'émetteur pour les polarisations $V_{BE} = 0,2 \text{ V}$ et $V_{BE} = 0,95 \text{ V}$. Ceci nous permet tout d'abord de mieux illustrer l'influence des grilles de contrôle. Si dans le cas de faible injection, cette figure montre que la charge latérale stockée est faible, par contre pour le cas de très forte injection, on remarque que la concentration d'électrons chute en raison de la présence de la jonction collecteur base; elle reste importante par rapport au dopage de base dans une région qui s'étend sur plusieurs microns ($\approx 7 \mu$ alors que la base latérale a une dimension de 20μ).

Sur la figure IV.29 nous avons tracé pour ces mêmes valeurs de polarisation la concentration d'électrons en fonction de x dans la zone frontale ainsi que la concentration de



$$h = 1 \mu$$

$$W_B = 0,5 \mu$$

$$N_E = 10^{20} \text{ at/cm}^3$$

$$N_B = 6 \cdot 10^{16} \text{ at/cm}^3$$

$$N_C = 6 \cdot 10^{15} \text{ at/cm}^3$$

$$V_{CE} = 2,5 \text{ V}$$

$$V_{G1} = 0 \text{ V}$$

$$V_{G2} = 1,25 \text{ V}$$

$$L_D = 33 \mu$$

Figure IV.29 - Concentration d'électrons dans la zone frontale.

trous pour le cas $V_{EB} = 0,95 \text{ V}$.

On remarque que, dans le cas de forte injection, les concentrations d'électrons et de trous sont quasiment égales dans la base et la zone collecteur proche de la base. Elles sont en ces régions nettement supérieures au dopage. On retrouve là l'hypothèse classique de neutralité de la base qui se trouve vérifiée approximativement même aux fortes injections ⁽²⁹⁾.

La charge stockée dans la zone frontale est néanmoins importante et il est intéressant de la comparer à la charge stockée dans la zone latérale. Dans le cas étudié, d'après les profils de concentrations en porteurs libres obtenus on voit que ce rapport, soit Q_{BL}/Q_{BF} est quasiment égal au rapport des surfaces de zone latérale de base, soit S_{BL} et de zone frontale d'émetteur, soit S_{BF} .

L'effet de stockage de charge dans la zone latérale devient donc très important dans les dispositifs pour lesquels

$$\frac{S_{BL}}{S_{BF}} \approx 1$$

IV.3.4 Autres effets

Nous n'avons pas présenté de résultats concernant les effets de défocalisation, de modulation d'injection ou de résistivité en raison essentiellement de la difficulté de discerner ces divers effets sur la structure choisie. Les quelques résultats présentés donnent une idée de l'utilisation que l'on peut faire de cette analyse bidimensionnelle et il est certain que l'étude d'effets tels que ceux que nous avons cités ci-dessus sera abordée simplement avec cette méthode. Cependant pour obtenir des résultats précis en ce domaine, il nous aurait fallu déterminer des dopages particuliers qui auraient permis de séparer ces effets. Cela nous aurait écarté sensiblement de l'ensemble de cette étude. Signalons simplement que ce travail est entrepris actuellement, avec les programmes écrits à partir de la méthode que nous avons présentée.

Nous avons présenté des résultats concernant des structures à géométrie classique sur lesquelles nous donnons une explication quantitative de phénomènes difficiles à évaluer. D'autres structures géométriquement plus complexes, de grand intérêt en micro-électronique (transistor latéral par exemple), dont l'étude analytique est pratiquement impossible, pourront être simulées en utilisant cette même méthode et leur optimisation sera grandement facilitée.

CHAPITRE V

SIMULATION DE LA FABRICATION DES DISPOSITIFSV.1 GENERALITES

L'ensemble des méthodes que nous avons définies et des programmes écrits, ne fournira de résultats précis que si nous sommes à même de fournir des données cohérentes et précises. En particulier, nous devons connaître la configuration géométrique du dispositif (profondeur des jonctions, longueur des canaux, ...) et les valeurs des dopages et mobilités en tout point dans les diverses zones ainsi que les lois de recombinaison et génération en volume et en surface. En fait, dans les dispositifs réels, il est illusoire d'espérer avoir des jonctions abruptes et le profil de dopage sera une fonction des variables géométriques. Il en sera de même pour les mobilités (il s'agit ici des valeurs des mobilités à champ faible).

Certaines lois utilisées dans le calcul (recombinaison par exemple) sont en fait relativement mal connues et l'utilisation des programmes devrait permettre d'améliorer la connaissance de ces phénomènes. De telles études ne sont possibles que si l'on peut connaître avec précision dopage et mobilités. En théorie il est possible de déterminer les mobilités en fonction du dopage avec une précision acceptable⁽³⁹⁾. Par contre, la détermination du profil de dopage est indispensable pour utiliser le modèle précédent. Les profils varient selon les processus technologiques de fabrication et les divers dispositifs. Il est donc indispensable soit de mesurer le profil avec précision, soit de le calculer en fonction des conditions réelles de fabrication (température, temps, ...).

V.2 DIFFICULTES DES MESURES

On peut effectivement mesurer directement les profils de dopage et même les mobilités en utilisant des mesures de résistance carrée et d'effet Hall^(24, 25) faites pour diverses valeurs de la profondeur dans le dispositif (on détruit alors celui-ci par oxydation anodique). D'autres techniques seraient sans doute utilisables^(2, 3) mais il est bien évident que tout système de mesure, vu la complexité du problème, donnera une précision assez médiocre et nécessitera toujours un nombre élevé d'opérations successives ce qui représentera un travail très important et bien souvent sera destructif pour le dispositif.

Par ailleurs quand on utilisera les quelques points mesurés pour décrire un dispositif à étudier, il faudra effectuer un calcul d'interpolation sur ces points pour connaître le dopage en tout point ce qui introduit une erreur supplémentaire. En outre les mesures ne nous permettent pas pour l'instant d'obtenir un profil bidimensionnel.

Il serait par ailleurs intéressant de pouvoir prédire le comportement d'un dispositif avant même de le réaliser. Ceci est possible à condition que l'on en connaisse le profil de dopage. Il semblait donc indispensable, pour pouvoir utiliser pleinement le modèle que nous avons défini, de savoir calculer le profil de dopage d'un dispositif en fonction des conditions de fabrication.

C'est ce que nous nous sommes attaché à faire pour la technique de diffusion qui est la plus utilisée actuellement.

Les résultats obtenus en ce domaine devraient d'ailleurs permettre de réaliser une optimisation des dispositifs en fonction du cahier des charges qui leur est imposé, avant même d'entreprendre leur réalisation technologique. Ceci entraînerait dans tous les cas un gain de temps et une économie notable au niveau des études d'approche.

V. 3 SYSTEME D'EQUATIONS

L'étude des phénomènes de diffusion est extrêmement complexe car plusieurs mécanismes différents se superposent.

Il n'était pas dans nos intentions de reprendre cette étude, aussi nous nous sommes contenté de reprendre une formulation globale proposée récemment^(30, 31). Nous n'explicitons donc pas les considérations physiques qui amènent à poser le système d'équations. Précisons simplement que dans ce système on tient compte des phénomènes dus au champ électrique et des interactions entre les divers mécanismes possibles de diffusion (d'une façon très globable).

On peut donc écrire (en inconnues non normalisées) :

$$\vec{J} = -D \cdot \text{grad}(C) - \mu \cdot C \cdot \vec{E} \cdot Z \quad (\text{V. 1})$$

où J est le flux d'impuretés

C la concentration

E le champ électrique

μ mobilité de l'impureté

Z charge de départ

D coefficient de diffusion

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\text{div}(J) \quad (\text{V. 2})$$

En fait nous nous intéressons à la diffusion d'impuretés de type "donneur" ou "accepteur", on devra donc écrire les équations (V. 1) et (V. 2) pour chacune des deux impuretés. Une fois introduites dans le réseau cristallin, les impuretés vont s'ioniser et créer des charges libres. Pour évaluer le champ électrique E il conviendrait donc de résoudre l'équation de Poisson et d'évaluer les courants de porteurs libres. Ceci nous amènerait à devoir utiliser un modèle de conduction dans les semiconducteurs en transitoire en calculant la variation du dopage. Cette façon de faire est actuellement inintéressante ne serait-ce qu'en raison du temps que nécessiterait un tel calcul.

V. 3. 1 - Influence du champ électrique

Nous supposons donc la neutralité électrique en tout point (ce qui revient à négliger la charge d'espace alors que les modèles simplifiés de diffusion négligent en général le champ lui-même) et que les impuretés sont totalement ionisées.

On a donc :

$$C_A + n - C_D - p = 0 \quad (V. 3)$$

On suppose en outre que l'on est en équilibre thermodynamique et que :

$$np = n_i^2 \quad (V. 4)$$

on a alors d'après (V. 3) et (V. 4) :

$$f = \frac{n}{n_i} = \frac{C_D - C_A}{2 n_i} + \sqrt{1 + \left(\frac{C_D - C_A}{2 n_i} \right)^2} \quad (V. 5)$$

On peut alors évaluer le champ électrique en fonction de f soit :

$$\vec{E} = \frac{kT}{q} \vec{\text{grad}} (\text{Log}(f)) \quad (V. 6)$$

On obtient alors les flux d'impuretés :

$$\vec{J}_D = -D_D \vec{\text{grad}}(C_D) - \mu_D C_D \frac{kT}{q} \frac{\partial \text{Log}(f)}{\partial C_D} \left[\vec{\text{grad}}(C_D) - \vec{\text{grad}}(C_A) \right] \quad (V. 7)$$

$$\vec{J}_A = -D_A \vec{\text{grad}}(C_A) + \mu_A C_A \frac{kT}{q} \frac{\partial \text{Log}(f)}{\partial C_A} \left[\vec{\text{grad}}(C_A) - \vec{\text{grad}}(C_D) \right] \quad (V. 8)$$

où l'on repère par A ou D le type de l'impureté.

On a alors en posant :

$$h_D = 1 + C_D \cdot \frac{\partial \text{Log}(f)}{\partial C_D} = 1 + \frac{C_D}{2 n_i} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{C_D - C_A}{2 n_i} \right)^2 + 1}} \quad (V. 9)$$

$$h_A = 1 - C_A \frac{\partial \text{Log}(f)}{\partial C_A} = 1 + \frac{C_A}{2 n_i} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{C_D - C_A}{2 n_i} \right)^2 + 1}} \quad (V. 10)$$

les équations des flux.

$$\vec{J}_D = -D_D \left[h_D \vec{\text{grad}}(C_D) - (h_D - 1) \vec{\text{grad}}(C_A) \right] \quad (V. 11)$$

$$\vec{J}_A = -D_A \left[h_A \vec{\text{grad}}(C_A) - (h_A - 1) \vec{\text{grad}}(C_D) \right] \quad (V. 12)$$

ce qui nous amène à devoir intégrer un système de deux équations paraboliques en C_D et C_A qui s'écrira sur un modèle unidimensionnel :

$$\frac{\partial C_D}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_D \left(h_D \frac{\partial C_D}{\partial x} - (h_D - 1) \frac{\partial C_A}{\partial x} \right) \right] \quad (V. 13)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_A \left(h_A \frac{\partial C_A}{\partial x} - (h_A - 1) \frac{\partial C_D}{\partial x} \right) \right] \quad (V. 14)$$

et sur un modèle bidimensionnel :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_D}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_D \left(h_D \frac{\partial C_D}{\partial x} - (h_D - 1) \frac{\partial C_A}{\partial x} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_D \left(h_D \frac{\partial C_D}{\partial y} - (h_D - 1) \frac{\partial C_A}{\partial y} \right) \right] \end{aligned} \quad (V. 15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_A \left(h_A \frac{\partial C_A}{\partial x} - (h_A - 1) \frac{\partial C_D}{\partial x} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_A \left(h_A \frac{\partial C_A}{\partial y} - (h_A - 1) \frac{\partial C_D}{\partial y} \right) \right] \end{aligned} \quad (V.16)$$

V. 3. 2. - Coefficients de diffusion

Selon le type de mécanisme physique envisagé pour la diffusion, le calcul des coefficients conduira à des résultats différents. Le modèle mathématique que nous présentons permettra sans aucun doute de mieux connaître et de comparer les diverses formulations possibles. D'après le mode de calcul itératif que nous avons employé, il est très facile d'introduire un coefficient de diffusion variable. Il sera néanmoins indispensable que les coefficients D_A et D_D soient des fonctions connues de C_A et C_D . Pour les études que nous avons traitées, nous avons pris des lois de type :

$$\begin{aligned} D_D &= D_{OD} \frac{2 + \beta \left[\frac{C_D}{n_i} + 1 \right]}{2 + \beta} \\ D_A &= D_{OA} \frac{2 + \beta' \left[\frac{n_i}{C_A + n_i} \right]}{2 + \beta'} \end{aligned} \quad (V.17)$$

où D_{OD} et D_{OA} sont les valeurs des coefficients pour le semiconducteur intrinsèque,

β et β' sont des coefficients qui caractérisent le processus de diffusion de l'impureté que l'on diffuse.

V. 4 CONDITIONS AUX LIMITES

Sans entrer dans les détails de la fabrication des dispositifs, on sait que l'on peut distinguer plusieurs phases distinctes dans le processus technologique.

Partant d'un barreau de silicium dopé de façon uniforme en atomes donneurs par exemple, pour réaliser un transistor bipolaire, on sera amené à effectuer les opérations suivantes :

a) Diffusion de la base

1. Pré-dépôt d'atomes accepteurs
2. Redistribution des atomes accepteurs

b) Diffusion de l'émetteur

3. Pré-dépôt d'atomes donneurs
4. Redistribution des atomes donneurs.

- Les phases de pré-dépôt consistent à partir d'un gaz porteur, à faire diffuser une certaine quantité d'atomes dans le silicium. Ces impuretés, compte-tenu des valeurs des coefficients et du temps du pré-dépôt resteront très proches de la surface.

- Les phases de redistribution consistent à remplacer le gaz porteur par de l'oxygène (sec ou humide) et, en élevant la température en général, on laisse les impuretés diffuser dans l'ensemble du volume pour obtenir le profil désiré. Ces phases de redistribution s'accompagnent donc en général de croissance d'oxyde dans lequel un certain nombre des atomes prédéposés vont diffuser vers l'extérieur du dispositif (phénomène d'exodiffusion).

A chacun de ces deux types de processus correspondront des conditions aux limites différentes.

V. 4. 1 - Modèle unidimensionnel.

- Pré-dépôt (figure V. 1)

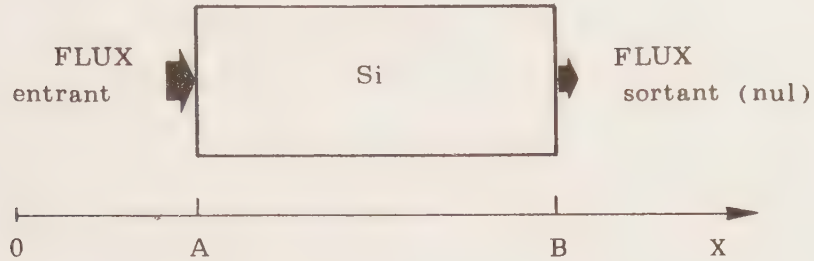


Figure V.1 - Diffusion unidimensionnelle (prédépôt)

- On suppose que le flux sortant est nul, soit :

$$\frac{\partial C_D}{\partial x} (B) = \frac{\partial C_A}{\partial x} (B) = 0 \quad (V. 19)$$

- On suppose que l'on connaît le flux entrant en surface :

$$J_D = \alpha (C_o - C_D(A)) \quad (V. 20)$$

ou

$$J_A = \alpha (C_o - C_A(A))$$

selon que l'on fait une diffusion donneur ou accepteur. C_o est la concentration dans le gaz porteur. On pourrait bien évidemment prendre d'autres types de lois à condition toutefois qu'elles restent de type Neumann et que l'on ait une expression du flux en fonction de la concentration en surface exclusivement.

On pourrait également utiliser des conditions de type Dirichlet en se donnant les valeurs des concentrations aux limites A et B.

- Pour solution initiale, on prendra soit le résultat d'une phase antérieure, soit une répartition uniforme (cas d'un premier pré-dépôt).

- Redistribution (figure V. 2)

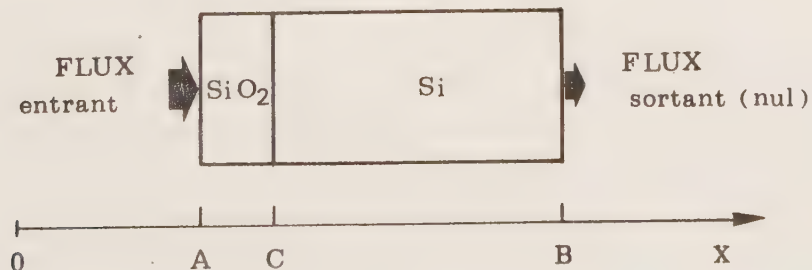


Figure V.2 - Diffusion unidimensionnelle (redistribution)

Les lois de diffusion dans l'oxyde sont les mêmes que pour le semiconducteur et l'on ne tient pas compte de l'influence du champ électrique (les valeurs des coefficients de diffusion sont bien évidemment différentes).

- Les conditions aux limites en A et B seront les mêmes que pour le pré-dépôt.
- La concentration à l'instant $t = 0$ est le résultat d'une phase précédente.

Il reste à écrire l'équation à l'interface : Si - SiO₂.

Si l'on appelle m le coefficient de ségrégation :

$$m = \frac{C_{\text{Si}}}{C_{\text{SiO}_2}} \quad (\text{V.21})$$

- β le rapport entre l'épaisseur de silicium oxydé et l'épaisseur de silice créée,
 - $v(t)$ la vitesse d'oxydation,
- on peut alors écrire⁽³⁰⁾ :

$$C_{\text{SiO}_2} \left(\beta - \frac{1}{m} \right) v(t) = D_{\text{SiO}_2} \cdot \frac{\partial C_{\text{SiO}_2}}{\partial x} - D_{\text{Si}} \cdot \frac{\partial C_{\text{Si}}}{\partial x} \quad (\text{V.22})$$

V.4.2 - Modèle bidimensionnel.

- Pré-dépôt

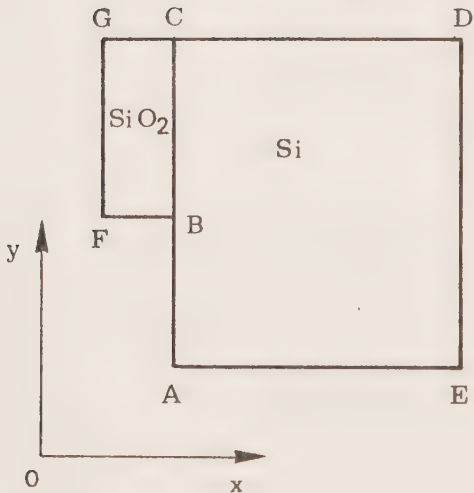


Figure V.3 - Modèle bidimensionnel de diffusion (prédépôt)

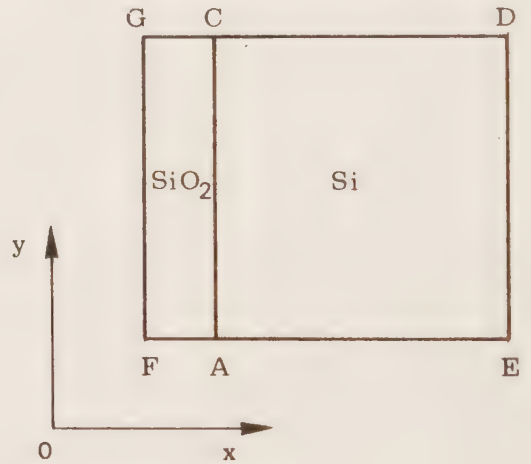


Figure V.4 - Modèle bidimensionnel de diffusion (redistribution)

Nous ferons les mêmes hypothèses que pour le modèle unidimensionnel. Cependant dans l'étude bidimensionnelle on devrait tenir compte de la présence d'oxyde même dans les cas de pré-dépôt (en dehors de la "fenêtre" par laquelle on effectue le pré-dépôt). En fait ce phénomène semble avoir une influence relativement faible et actuellement nous n'en avons pas tenu compte et nous étudions uniquement le domaine A C D E (figure V.3).

Il conviendrait dans une étude plus poussée des phénomènes de diffusion, de revenir sur ce point. On a donc les conditions aux limites:

sur BC et DE :

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (V.23)$$

sur CD et AE (par raison de symétrie ou d'éloignement de la zone active) :

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad (V.24)$$

sur AB :

$$J_n = f(C) \quad (V.25)$$

où J_n est la composante normale du flux. Nous avons pris la même fonction f que pour le modèle unidimensionnel, soit :

$$f(C) = \alpha(C_o - C) \quad (V.26)$$

- Redistribution (figure V.4)

Comme pour le pré-dépôt, nous avons simplifié légèrement le problème posé par la présence de l'oxyde. En effet il conviendrait ici de tenir compte d'une vitesse de croissance variable en fonction de Y . Nous avons pour cette étude supposé que la vitesse était indépendante de Y . Par ailleurs on suppose qu'au début de l'oxydation, l'épaisseur d'oxyde est nulle. Ces hypothèses seraient également à modifier au cours d'une étude spécifique des phénomènes de diffusion.

On en déduit donc les conditions aux limites :

sur FE et GD :

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad (V.27)$$

sur DE :

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (V.28)$$

sur FG :

$$J_n = f'(C) \quad (V.29)$$

conditions identiques à celles du pré-dépôt, la fonction f' étant de même forme que f mais les valeurs des paramètres y sont différentes.

L'équation d'interface est identique à celle obtenue pour le modèle unidimensionnel. En fait pour des raisons de stabilité des méthodes numériques, nous avons préféré la remplacer par une équation équivalente exprimant la conservation des charges stockées.

V.5 ETUDE DU PROBLEME MATHEMATIQUE.

Nous sommes donc amené à rechercher la solution, si elle existe, d'un système de deux équations paraboliques non linéaires.

Bien que la forme des non-linéarités soit beaucoup plus simple que celle rencontrée dans le modèle de circulation des porteurs, le problème de l'existence et de l'unicité de la solution est tout aussi difficile à résoudre. Il semble que ce soit actuellement impossible. Cependant nous pouvons démontrer un certain nombre de résultats partiels ou, plus précisément il est possible de démontrer l'existence et l'unicité de la solution dans des cas particuliers pour lesquels on néglige certains effets (champ électrique et variation des coefficients de diffusion en particulier). Pour le cas général on admettra, par analogie, que la solution est unique et existe.

V.5.1 Etude du cas simplifié

Si l'on néglige l'influence du champ électrique et que l'on suppose que le coefficient de diffusion est constant dans tout le domaine, on se trouve ramené au problème classique de l'équation de la chaleur (que l'on devra résoudre pour chacune des impuretés)

$$\frac{\partial u}{\partial t} - A u = f \quad (V.30)$$

où A est un opérateur différentiel en $\frac{\partial}{\partial x_i}$ seulement. Ici, on a sur le modèle unidimensionnel par exemple

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (V.31)$$

On peut alors aisément montrer l'unicité de la solution : supposons qu'il existe deux solutions C_1 et C_2 . On a alors $X = C_1 - C_2$ qui satisfait au problème homogène

$$\frac{\partial X}{\partial t} - \Delta X = 0 \quad (V.32)$$

avec les conditions initiales et aux limites :

$$X(x, 0) = 0 \quad (V.33)$$

$$X = 0 \quad (V.34)$$

sur les frontières.

En utilisant le principe du maximum, c'est-à-dire que le maximum de X est atteint en un point x_0, t_0 qui est tel que $t_0 = 0$ ou appartenant à la frontière, on montre ⁽¹⁵⁾ l'unicité de la solution du problème de la chaleur.

L'existence de la solution est un peu plus difficile à démontrer. Elle consistera à remarquer que l'on peut considérer la solution générale du problème comme la somme des solutions de 3 problèmes voisins :

- a) un problème à condition aux limites nulles
- b) un problème à conditions initiales nulles
- c) un problème de Dirichlet,

et à montrer l'existence des solutions pour chacun de ces problèmes.

V.6 METHODES NUMERIQUES

Comme pour le modèle précédemment décrit, nous sommes amené à remplacer le problème continu par un problème discret. On peut montrer que dans les cas d'équations paraboliques linéaires cette façon de faire est parfaitement rigoureuse. Nous admettrons ce résultat pour le problème non linéaire traité.

Nous utiliserons également des pas variables tant dans l'espace que dans le temps pour tenir compte des variations des phénomènes de diffusion dans l'espace et le temps.

Pour résoudre l'équation générale

$$L(u) = \frac{\partial u}{\partial t} - a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2b \frac{\partial u}{\partial x} - c \cdot u = d \quad (V.35)$$

où a, b, c, d sont des fonctions de x et t (dans lesquelles on fera entrer les non linéarités), et

en notant

$$u(x_i, t_j) = u_{i,j} \quad (V.36)$$

on approximera les dérivées de u par des différences où nous ferons apparaître les points de type $u(x_i, t_j + \theta \Delta t)$ (8, 57).

Pour des raisons de stabilité ⁽²⁰⁾ il est préférable de prendre une méthode purement implicite ($\theta = 1$) ce qui amène à devoir résoudre un système d'équations linéaires mais permet d'utiliser des valeurs de pas en temps Δt plus élevées que si l'on utilisait une méthode explicite. On obtient alors pour l'équation (V.35) un ensemble d'équations

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} - a_{i,j+1} \frac{u_{i+1,j+1} m_{(i-1)} + u_{i-1,j+1} m_{(i)} + u_{i,j+1} (m_{(i)} + m_{(i-1)})}{m_{(i)} m_{(i-1)} \frac{m_{(i)} + m_{(i-1)}}{2}} \\ - 2 b_{i,j+1} \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i-1,j+1}}{m_{(i)} + m_{(i-1)}} - c_{i,j+1} u_{i,j+1} = d_{i,j+1} \end{aligned} \quad (V.37)$$

où l'on a appelé m les valeurs des pas en x et Δt le pas en temps.

Cela, appliqué au problème de diffusion, nous donne, pour des impuretés donatrices par exemple sur le modèle unidimensionnel (en ne portant j que s'il est différent de $j+1$ pour alléger l'écriture)

$$\begin{aligned} \frac{C_i - C_{i,j}}{\Delta t} - 2 \cdot \frac{D \cdot h_{D i+1/2} \frac{C_{i+1} - C_i}{m_i} - D h_{D i-1/2} \frac{C_i - C_{i-1}}{m_{i-1}}}{m_i + m_{i-1}} \\ + 2 \cdot \frac{D(h_D - 1)_{i+1/2} \frac{C'_{i+1} - C'_i}{m_i} - D(h_D - 1)_{i-1/2} \frac{C'_i - C'_{i-1}}{m_{i-1}}}{m_i + m_{i-1}} = 0 \end{aligned} \quad (V.38)$$

on a remplacé C_D par C , C_A par C' , les quantités telles $D h_{D i+1/2}$ signifiant

$$D \cdot h_{D i+1/2} = \frac{(D_{i+1} + D_i) (h_{D i+1} + h_i)}{4} \quad (V.39)$$

et des équations équivalentes pour l'autre type d'impureté.

Pour le modèle bidimensionnel on remplacerait les termes dérivées selon les variables géométriques comme cela a été exposé au chapitre II et on obtiendrait de même deux systèmes d'équations en C_A et C_D .

V.6.1 Résolution des systèmes

Quand on écrit les équations discrétisées en chacun des points on obtient un système de $2p$ équations si p est le nombre total de points. En fait il nous a semblé qu'il était plus intéressant de couper le système en deux sous-systèmes :

- l'un dont les inconnues sont C_D et où l'on suppose C_A connu ;
- l'autre dont les inconnues sont C_A et où l'on suppose C_D connu.

Cette façon de faire nous amène à devoir utiliser un processus itératif basé sur la méthode du point fixe. Ceci n'est pas un inconvénient car étant donné la non linéarité du problème, nous y aurions été contraint. Par ailleurs ceci nous offre l'avantage d'obtenir des systèmes dont les matrices sont connues et pour lesquelles les méthodes numériques sont faciles à mettre en oeuvre. On retrouve en effet des matrices dont les structures sont identiques à celles rencontrées pour le modèle de circulation des porteurs :

- des matrices tridiagonales pour l'étude unidimensionnelle,
- des matrices tridiagonales par bloc pour l'étude bidimensionnelle.

Nous avons utilisé, pour résoudre ces systèmes, les méthodes que nous avons exposées précédemment (chapitre II).

Des considérations d'ordre physique justifient d'ailleurs le choix de cette méthode. En effet l'interaction de l'une des impuretés sur l'autre ne modifie pas fondamentalement la nature des phénomènes. Elle entraîne soit un ralentissement, soit une accélération de la diffusion selon le type d'impureté considéré, mais l'ordre de grandeur des phénomènes reste identique. On peut raisonnablement considérer cette interaction comme un terme correctif du phénomène fondamental de diffusion.

V.6.2 Algorithme et programmes

La méthode numérique décrite ci-dessus a été programmée pour les modèles uni et bidimensionnels. L'algorithme général est identique dans les deux cas :

- 1) Entrée des données et initialisation.
- 2) Calcul du pas en temps. Calcul éventuel de l'épaisseur d'oxyde créé.
- 3) Calcul des coefficients de diffusion.
- 4) Résolution des deux systèmes d'équations.
- 5) Test convergence et retour éventuel en 3.
- 6) Incrémentation du temps.

Test final (le temps total de simulation est-il atteint ?)

Retour éventuel en 2.

Les programmes actuels sont écrits en Fortran IV et utilisés sur IBM 360 50 ou 360 67. Ils sont relativement courts (1 000 cartes environ pour le modèle bidimensionnel sous système CP/CMS) et rapides. Le calcul pour un intervalle de temps nécessite de 90 à 30 itérations (ce nombre décroît au fur et à mesure que le temps de diffusion croît) pour le modèle bidimensionnel (méthode L.S.O.R.) et de 15 à 3 itérations pour le modèle unidimensionnel. Le temps de calcul est bien sûr toujours fonction du nombre de points utilisés.

V.6.3 Choix de la méthode numérique - Accélération

Nous avons également comparé, sur ce problème, les vitesses respectives des diverses méthodes que nous avons proposées au chapitre II. La méthode de sur-relaxation par point s'est encore avérée la plus lente, aussi nous l'avons abandonnée. Par contre la méthode de sur-relaxation par bloc et la méthode de Peaceman-Rachford nécessitent des temps de calcul quasi-identiques.

Vu la relative rapidité du processus, nous n'avons pas à l'heure actuelle, reporté sur ces programmes les diverses améliorations proposées au chapitre 3. Il serait intéressant de faire ce travail, si l'on désirait utiliser ces programmes fréquemment pour mener une étude approfondie des phénomènes de diffusion. En ce cas on arriverait, sans doute, à devoir préférer la méthode de sur-relaxation par bloc pour pouvoir également limiter le domaine au cours du calcul.

V.6.4 Problèmes de l'interface

Dans les phases de redistribution, nous avons vu que, en général, nous devons tenir compte des phénomènes d'oxydation. Cela pose un certain nombre de problèmes dus essentiellement au fait que l'abscisse de l'interface varie au cours du temps. Par ailleurs nous avons remarqué qu'il était préférable, pour l'interface, d'écrire une équation de conservation des charges plutôt que l'équation d'interface elle-même (ces deux façons de faire sont équivalentes car l'équation d'interface est écrite pour tenir compte de la conservation des charges). On écrit alors que si ϵ est l'épaisseur de silice créée et ϵ_1 l'épaisseur de silicium détruit (sur le modèle unidimensionnel par exemple) :

$$\epsilon_1 \cdot C_{Si}(t) = \epsilon C_{SiO_2} - D_{Si} \cdot \frac{\partial C_{Si}}{\partial x} + D_{SiO_2} \frac{\partial C_{SiO_2}}{\partial x} \quad (V.40)$$

Il nous faut donc connaître la valeur des concentrations à l'interface pour toutes les valeurs du temps. Ceci peut se faire de deux manières :

- prendre les pas en x indépendamment de la variation de l'interface et interpoler entre les points du maillage pour connaître la valeur à l'interface.

- calculer les valeurs des pas en x en fonction des pas en temps utilisés.

Selon le but recherché dans l'étude, on préférera l'une ou l'autre solution. En effet aucune de ces méthodes n'est pleinement satisfaisante.

- Si l'on prend la première solution, l'interpolation entraînera des erreurs relativement importantes qui se traduiront par une forte imprécision sur la concentration dans la silice (dans ce matériau la diffusion est en effet très faible). Par ailleurs cette façon de procéder nécessite de faire varier le nombre de points effectifs du maillage au cours du calcul (pour tenir compte de la différence d'épaisseur entre silice et silicium).

- La deuxième solution par contre est plus précise quant à la connaissance des concentrations dans la silice, mais elle nécessite de préciser avant le calcul les valeurs des pas en temps qui seront utilisées (et ce pour toutes les phases successives) ainsi que les vitesses d'oxydation des diverses phases, de façon à calculer à l'avance les valeurs de pas. Ceci interdit

pratiquement de faire varier le pas en temps en fonction des résultats obtenus, ce qui est la façon la plus intéressante de calculer le pas en temps. Par ailleurs si on désire modifier le temps total de redistribution par exemple, il faudra recommencer tout le calcul alors que, dans le premier cas, on dispose d'une souplesse d'utilisation beaucoup plus grande.

Pour générer une courbe de dopage à utiliser dans le modèle de semi-conducteur on préférera donc la première solution alors que dans une étude de la diffusion on préférera l'autre.

V.7 RESULTATS OBTENUS

Nous ne présenterons ici que quelques résultats obtenus avec la méthode présentée, sans chercher à en donner une interprétation physique détaillée. Le but principal de cette étude, qui était de fournir simplement des profils de dopage corrects, semble en effet avoir été atteint et nous pouvons, par cette méthode, obtenir le profil de dopage d'un dispositif, connaissant simplement les paramètres de sa fabrication (durées et conditions des diverses phases). La précision de ce profil sera au moins aussi bonne que celle que l'on obtiendrait par un système de mesures, sinon nettement supérieure.

Nous pensons que ces programmes pourront être utilisés avec profit pour une étude exhaustive des problèmes de diffusion, comme les premiers résultats obtenus semblent le montrer ⁽³²⁾. On trouvera sur les figures V.5 à V.8 quelques résultats obtenus par notre analyse (uni et bidimensionnelle).

Ces programmes permettront d'introduire d'autres phénomènes physiques dans les équations de base, ce qui offre un grand intérêt dans les études physiques. Ils constituent une étape supplémentaire dans la liaison technologie-modèles mathématiques.

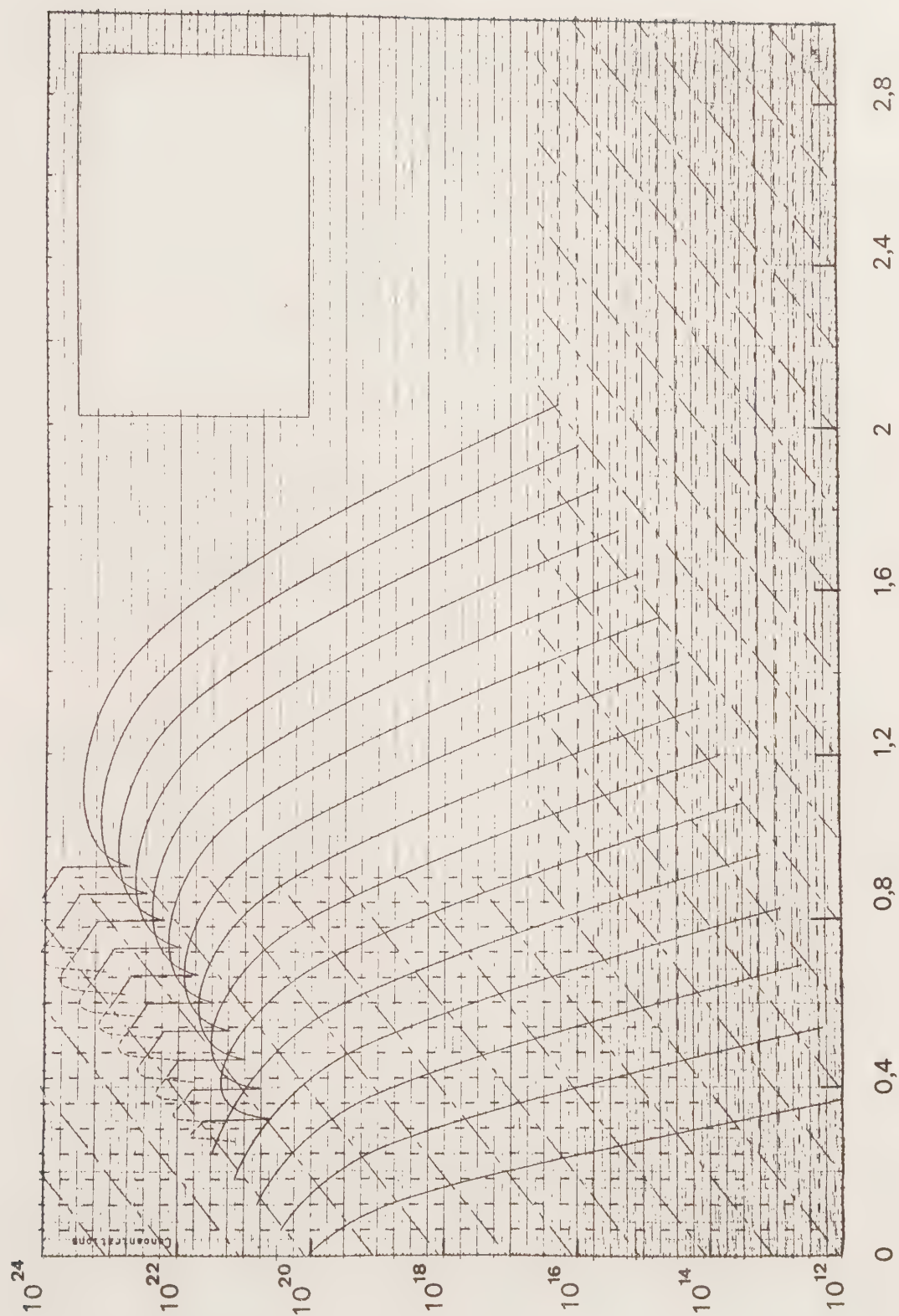
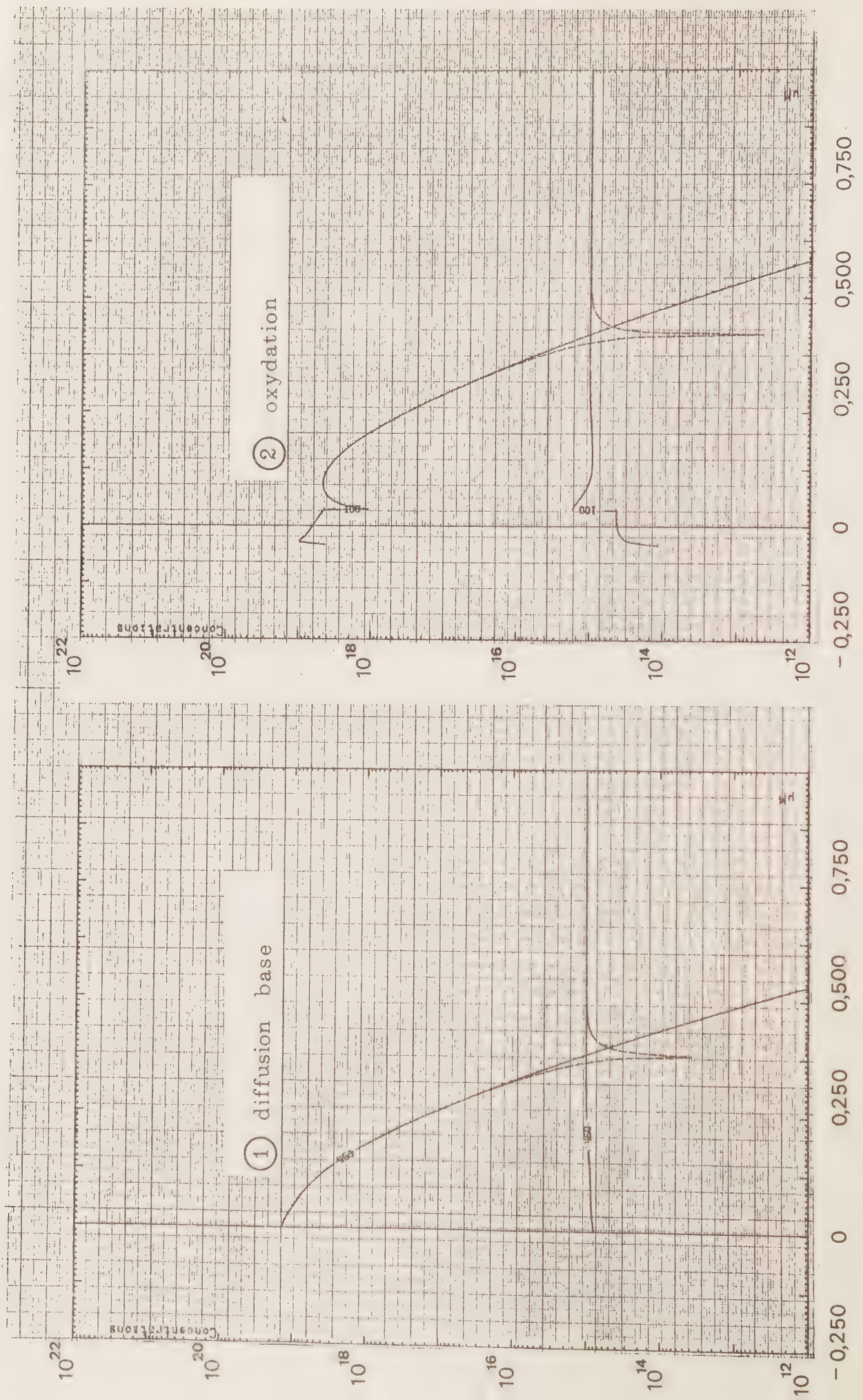


Figure V.6 - Evolution de la concentration en fonction du temps



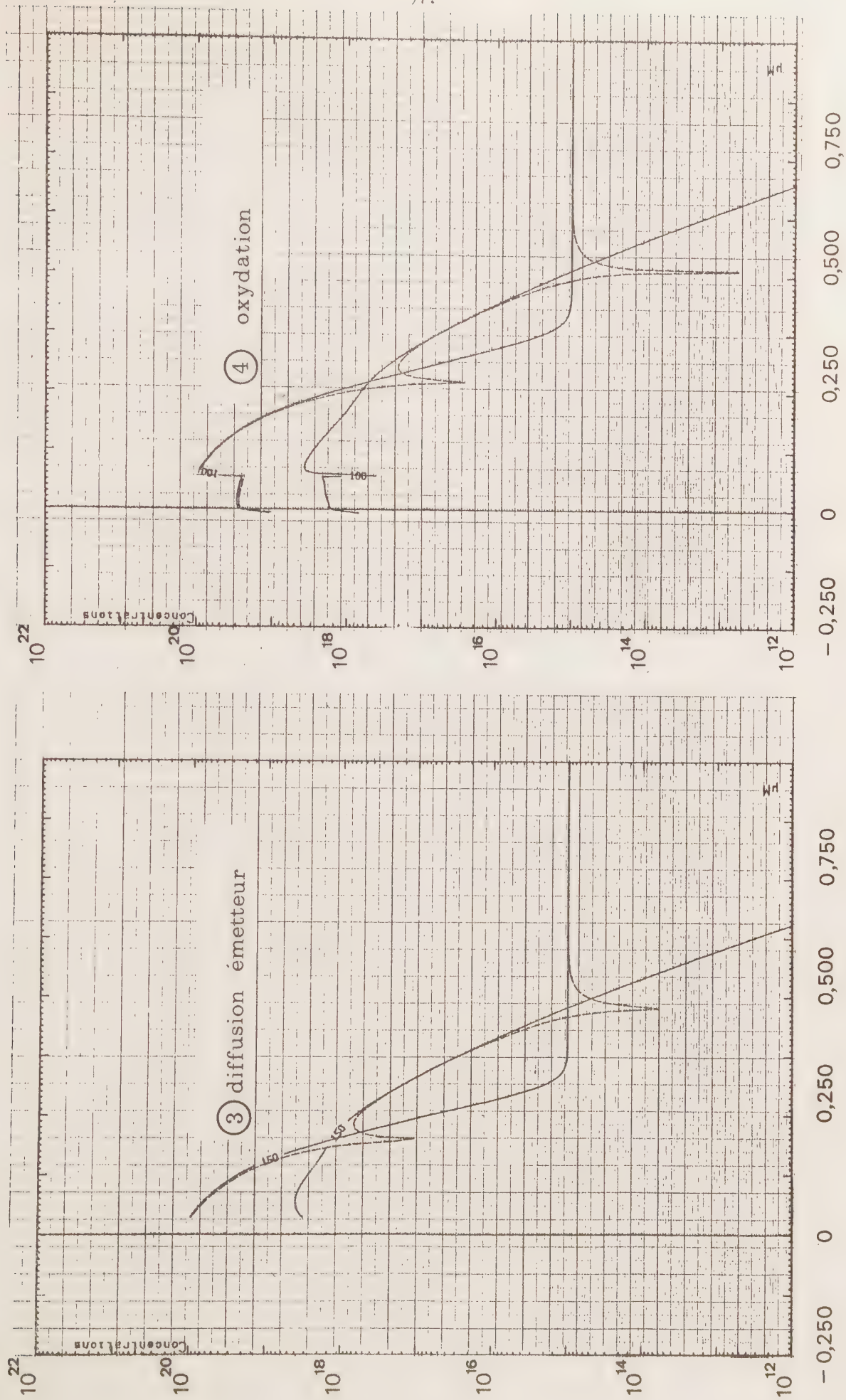


Figure V.5 - Fabrication d'un transistor

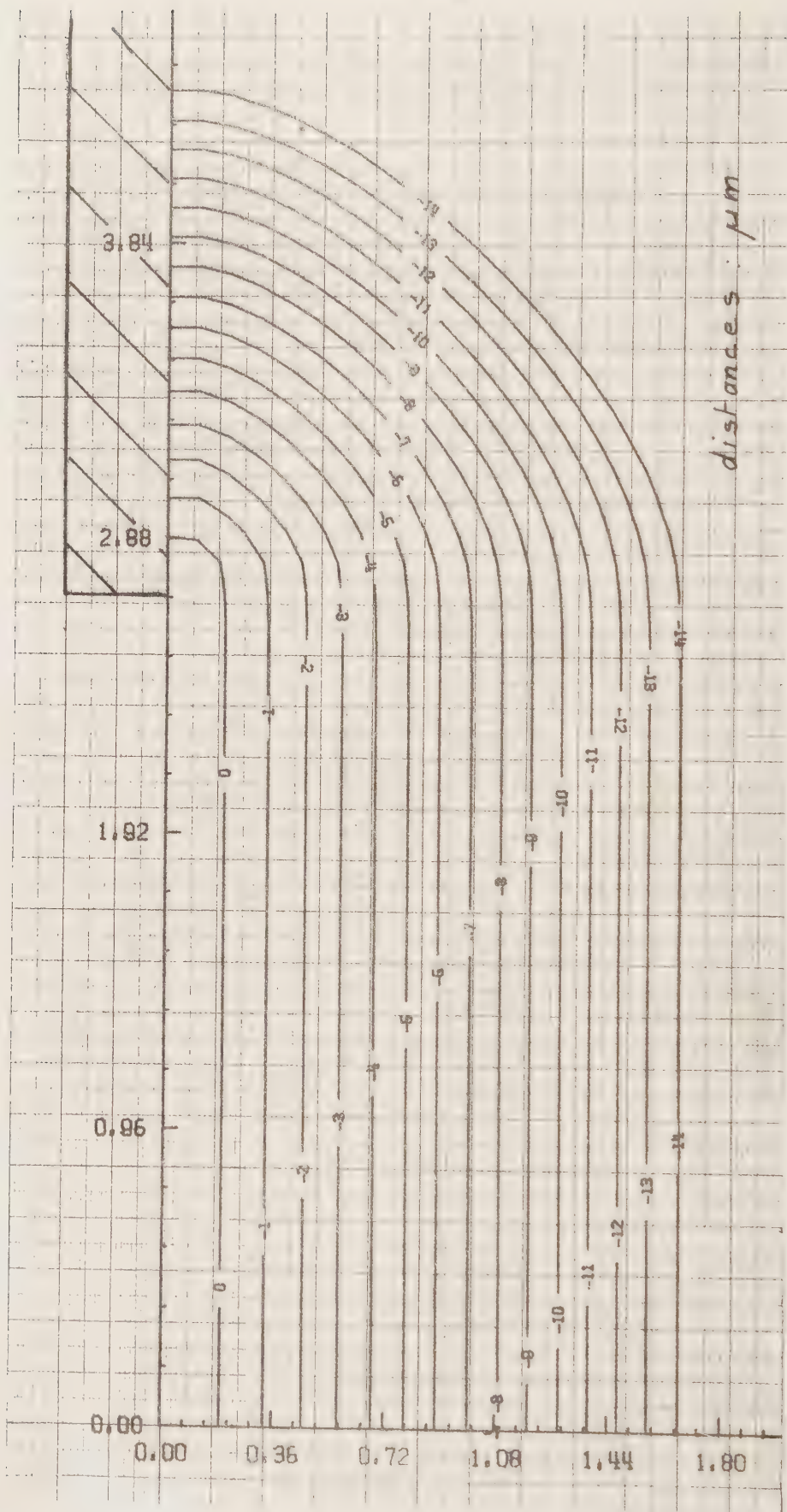


Figure V.7 - Lignes d'équiconcentration - Diffusion à concentration constante sur la fenêtre.

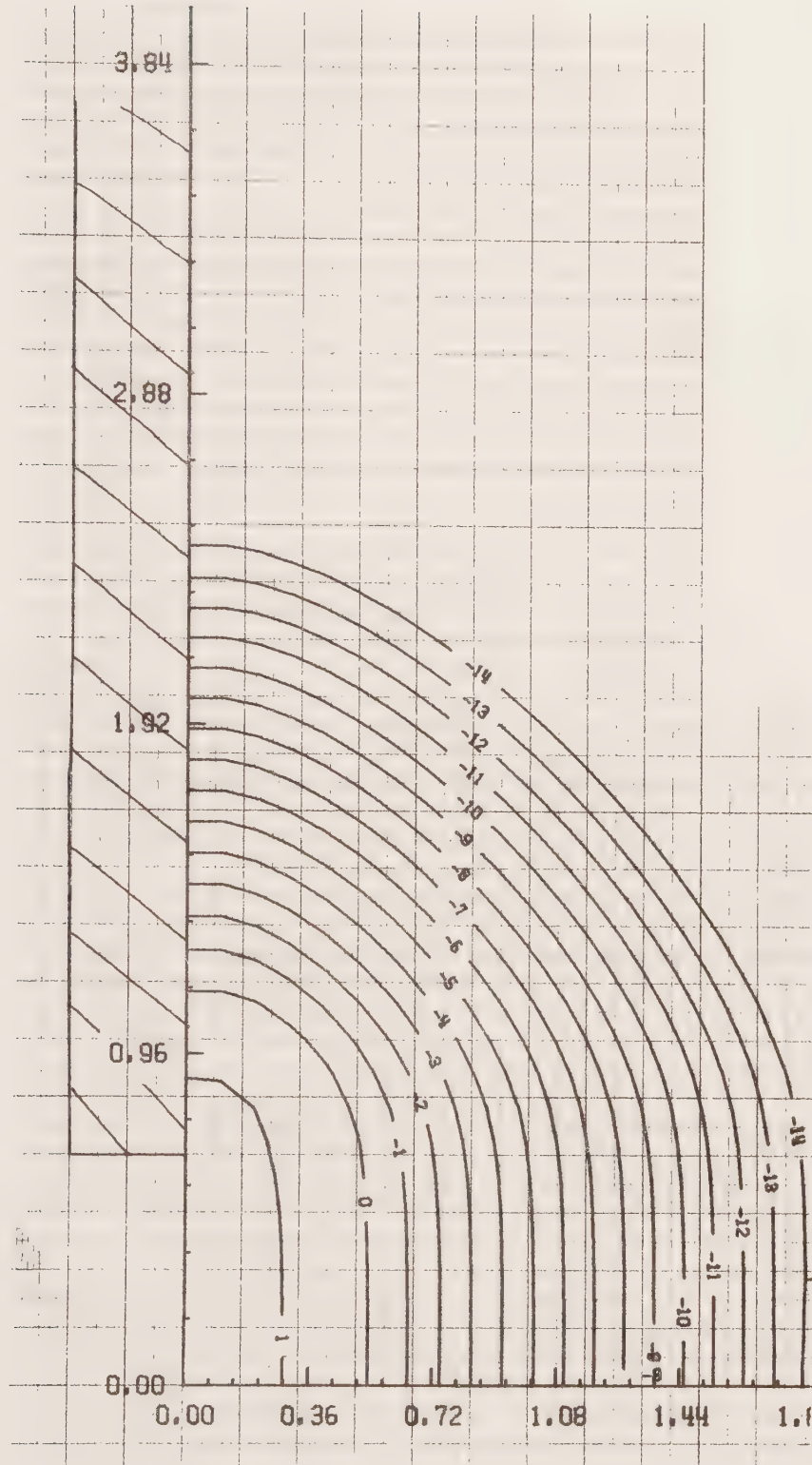


Figure V.8 - Lignes d'équiconcentration - Diffusion à flux variable à travers la fenêtre.

CONCLUSION

L'étude mathématique du fonctionnement et de la réalisation des dispositifs semi-conducteurs que nous avons présentée nous permet, indépendamment de toute technologie, de prévoir le comportement des dispositifs pour tous les régimes de fonctionnement normal. Les résultats obtenus semblent, pour les cas classiques que nous avons étudiés, en bonne concordance avec les connaissances antérieures et la précision atteinte est nettement supérieure à celle fournie par tout autre mode d'analyse. Cependant il convient de signaler que l'utilisation ultérieure de cette étude et des programmes que nous avons écrits restera toujours délicate et relativement coûteuse pour les raisons suivantes :

- Le temps de calcul restera toujours assez élevé.
- L'utilisation de cette méthode nécessite un calculateur rapide et de grosse capacité mémoire, étant donné la taille des programmes et le nombre important de données et d'inconnues nécessaires.
- Il sera relativement difficile de modifier, si nécessaire, des parties de programme (pour étudier des effets nouveaux, par exemple).
- La préparation des données sera toujours délicate, vu les difficultés et limitations exposées au chapitre III.

Cette difficulté d'emploi limitera sans doute l'utilisation de ce modèle à quelques spécialistes. Par contre, comme le montrent d'ailleurs les quelques applications présentées précédemment, il semble que cette méthode doive permettre :

- L'étude spécifique des problèmes de diffusion des impuretés dans les matériaux semi-conducteurs.
- L'étude des problèmes physiques de la conduction dans les semi-conducteurs et la simulation précise du comportement en continu des dispositifs, même dans le cas d'effets bidimensionnels.

En outre, ce modèle sera un outil très efficace d'aide à la conception des dispositifs, d'une part en permettant de prévoir les profils de dopage obtenus en fonction des conditions technologiques de fabrication et éventuellement d'ajuster ces conditions pour réaliser un type de profil donné, d'autre part en prévoyant les caractéristiques du dispositif en fonction du dopage et des données géométriques; cela doit permettre au fabricant de dispositifs de réaliser une optimisation des composants en utilisant sa technologie habituelle.

Par ailleurs, dans le cadre de la conception assistée par ordinateur et de la simulation des circuits électroniques, les résultats obtenus par cette analyse permettront d'une

part de vérifier la validité des hypothèses physiques qui ont été utilisées pour construire les modèles de C.A.O. et d'autre part d'en élaborer de nouveaux, si nécessaire.

Enfin, on pourra établir une liaison directe entre les modèles et les paramètres technologiques ce qui, jusqu'à présent, était une tâche très difficile et qui, en raison même de cette difficulté, était quelque peu délaissée en dépit de sa grande importance. Ceci permettra de diminuer le coût des études préalables qui sont actuellement purement technologiques.

Nous espérons que cet outil, en dépit de ses quelques imperfections, sera utilisé le plus largement possible et apportera une aide efficace tant aux constructeurs de dispositifs qu'aux chercheurs étudiant les problèmes physiques liés à la conduction dans les semi-conducteurs.

BIBLIOGRAPHIE

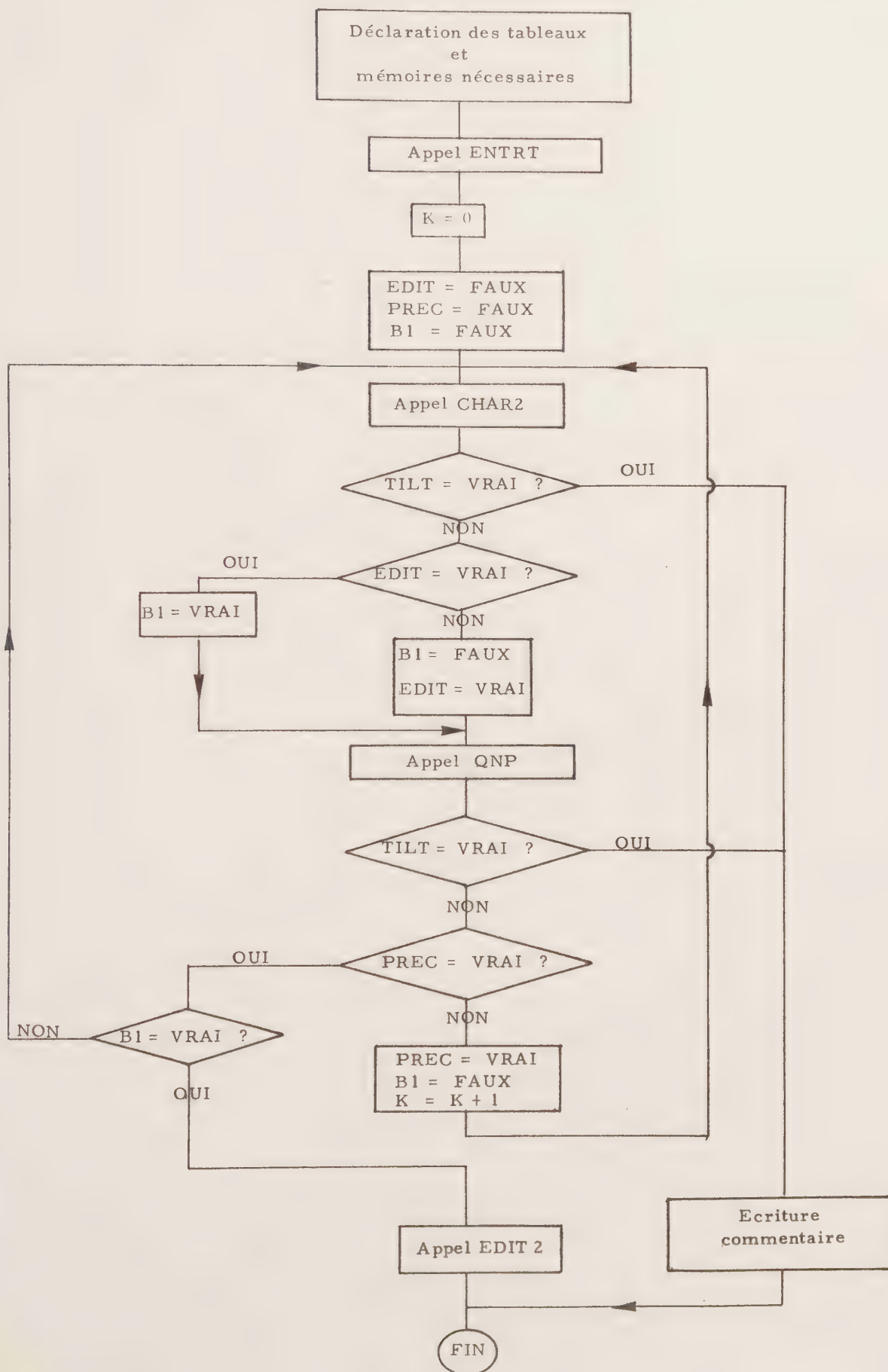
- (1) A. BLAIR, N. METROPOLIS, J. NEUMANN, A.H. TAUB, M. TSINGOU,
A study of a numerical solution of a two-dimensional hydrodynamical problem,
Math. Tables Aids Comput. 13 (1959) 145.
- (2) B. BLANCHARD, N. HILLERET, J.B. QUOIRIN,
Analyse par émission ionique secondaire des semiconducteurs,
Colloque A.V.I.S.E.M. 1971 (à paraître).
- (3) M. BRUEL, E. LIGEON, J. MONNIER,
Analyse par réaction nucléaire des semiconducteurs,
Colloque A.V.I.S.E.M., 1971 (à paraître).
- (4) H. BREZIS, M.G. CRANDALL, A. PAZY,
Perturbation of non linear maximal monotone sets in Banach space,
Comm. on Pure and Applied Math. 23 (1970) 123.
- (5) R. COURANT, D. HILBERT,
Methods of mathematical Physics,
Interscience Pub. New-York (1953).
- (6) E.H. CUTHILL, R. VARGA,
A method of normalized block iteration,
J. Assoc. Comput. Math. 6 (1959) 236.
- (7) A. DE MARI
An accurate numerical steady-state one-dimensional solution of the PN junction,
Solid-State Electronics, 11 (1968) 33.
- (8) J. DOUGLAS
A survey of numerical methods for parabolic differential equations,
Advances in Computers, vol. 2, p. 1, Academic Press New-York (1961).
- (9) J. DOUGLAS, H. RACHFORD
On the numerical solution of heat conduction problems in two or three space variables ,
Trans. Amer. Math. Soc. 82 (1956) 421.
- (10) N. DUNFORD, J.T. SCHWARTZ
Linear Operators, Interscience Pub. New-York (1958).
- (11) G.E. FORSYTHE , W.R. WASOW,
Finite difference methods for partial differential equations,
J. Wiley, New York (1960).
- (12) G. FOURNET
Physique électronique des solides, Eyrolles, Paris (1962).
- (13) N. GASTINEL,
Analyse numérique linéaire, Hermann, Paris (1966).
- (14) N. GASTINEL,
Itérations, méthodes discrètes.
Cours Faculté des Sciences de Grenoble (1968).
- (15) N. GASTINEL
Mathématiques pour l'informatique, T2 équations différentielles ,
Armand Colin, Paris (1970) .
- (16) A.S. GROVE
Physics and technology of semiconductor devices,
J. Wiley, New-York (1967).

- (17) A.S. GROVE, D.J. FITZGERALD
Surface effects on PN junctions, characteristics of surface space charge regions under non equilibrium conditions,
Solid State Electronics, 9 (1966) 783.
- (18) H.K. GUMMEL
A self consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations. I.E.E.E. Trans. on E.D., vol. ED-11 (1964) 455.
- (19) J. HELLER
Simultaneous successive and alternating direction iteration schemes,
J. Soc. Indust. Appl. Math. 8 (1960) 150.
- (20) J.B. KELLER
Resolution d'équations paraboliques aux dérivées partielles ("Méthodes mathématiques pour calculateurs arithmétiques"),
Dunod, Paris (1965)
- (21) C. LE CAN, K. HART, C. DE RUYTER
Le transistor à jonctions en communication
Bibliographie technique Philips (1964).
- (22) J.L. LIONS, E. MAGENES
Problèmes aux limites non homogènes et applications (volume 1)
Dunod, Paris (1968).
- (23) R. LYON-CAEN
Diodes et transistors utilisés en commutation,
Masson, Paris (1965).
- (24) H. MARINE
Mesures de profils par effet Hall
Note L.E.T.I./E.I. 513 bis, Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble (1970).
- (25) H. MARINE, J. MONNIER
Système automatique de mesure de mobilité et de concentration par effet Hall,
Note L.E.T.I./E.I. (à paraître). Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble.
- (26) G. MERCKEL, J. BOREL
Modèle du transistor MOS à saturation,
Annales du Colloque Microélectronique, Paris, 1970
Editions Chiron, Paris, tome 1.
- (27) G. MERCKEL, N. CUPCEA
Le transistor MOS (canal P). Théorie, schéma équivalent, conception de circuits intégrés.
Note L.E.T.I./M.E. No 633, Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble (1970).
- (28) R.D. MIDDLEBROOK
An introduction to junction transistor theory ,
J. Wiley, New-York (1957).
- (29) J.L. MOLL
Physics and technology of semi-conductor devices,
Mc Graw Hill (1964).
- (30) J. MONNIER
Modèles de diffusion,
Note L.E.T.I./E.I. No 35 (1970), Centre d' Etudes Nucléaires de Grenoble
- (31) J. MONNIER
Etude théorique et expérimentale de la diffusion,
Note L.E.T.I. (à paraître), Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble.

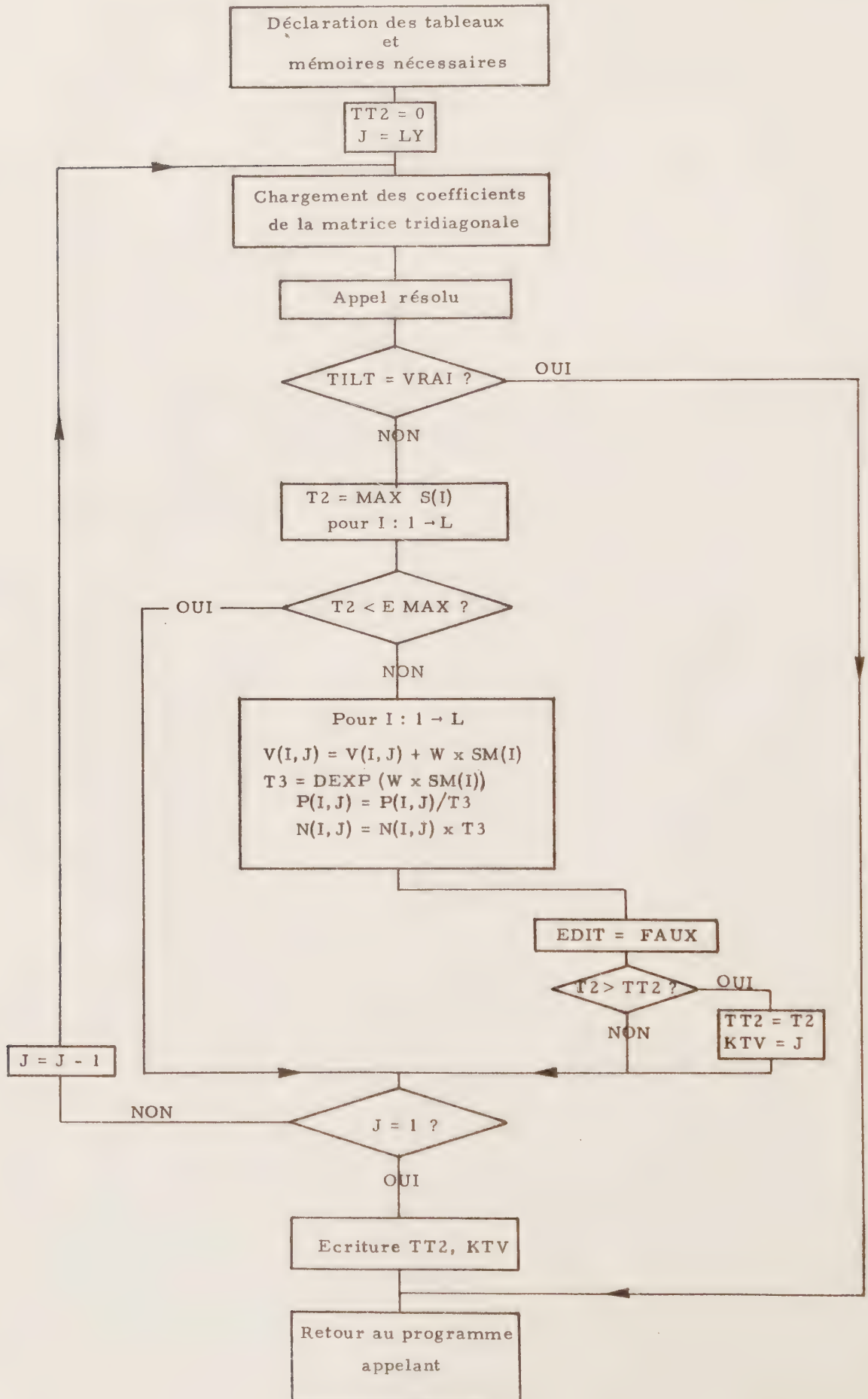
- (32) J. MONNIER, D. VANDORPE, M. STERN, A. MAFFEI
Programmes numériques d'étude de la diffusion
Journées D.G.R.S.T. Toulouse (L.A.A.S.), 29-30 mars 1971.
- (33) J. NECAS
Méthodes directes en théorie des équations elliptiques ,
Masson, Paris (1967).
- (34) E.H. NICOLLIAN, A. GOETZBERGER
The Si-SiO₂ interface electrical properties as determined by the metal-insulator-silicon conductance technique,
Bell Syst. Techn. J. 46, no 6 (1967) 1055.
- (35) L. NIRENBERG
Remarks on strongly elliptic partial differential equations
Comm. on Pure and Applied Math. (1955) 648.
- (36) A. NUSSBAUM
Semiconductor device physics,
Prentice Hall, New York (1962).
- (37) H.C. PAO, C.T. SAH
Effects of diffusion current on characteristics of metal oxide (insulator) semiconductor transistor,
Solid State Electronics 10 (1966) 927.
- (38) D.W. PEACEMAN, H.H. RACHFORD
The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations
J. of Soc. Indust. Appl. Math. 3 (1955) 28.
- (39) A.B. PHILLIPS
Transistor engineering
Mac Graw Hill, New York (1962).
- (40) V.G.K. REDDI, C.T. SAH
Source to drain resistance beyond pinch-off in metal oxide semiconductor transistors,
I.E.E.E. Trans. on E.D. (1965), 139.
- (41) RICHMAN P.
Modulation of space charge limited current flow in insulated gate field effect tetrodes,
I.E.E.E. Trans. on E.D., vol. ED-16 (1969) 759.
- (42) F. RIESZ, B. NAGY
Leçons d'analyse fonctionnelle,
Akad. Kiado, Budapest (1952).
- (43) D. ROBERT
Thèse 3ème cycle, Faculté des Sciences de Grenoble (1969).
- (44) R.T. ROCKAFELLER
On the maximality of sums of non linear operators (à paraître).
- (45) C.T. SAH
Characteristics of the metal oxide semiconductor transistor
I.E.E.E. on E.D., vol. E.D. 11, no 7 (1964) 324.
- (46) K. SAMINADAYAR, J.C. PFISTER
Evolution de la distribution des états d'interface dans les structures M.O.S. irradiées aux électrons et soumises à l'effet d'un traitement thermique sous champ.
Solid State Comm. 8 (1970) 2135.
- (47) L. SCHWARTZ
Méthodes mathématiques de la physique,
Hermann, Paris (1965).

- (48) W. SHOCKLEY
Electrons and holes in semiconductors,
D. Van Nostrand (1950).
- (49) J.W. SLOTBOOM
Iterative scheme for 1- and 2- dimensional D.C. transistor simulation,
Electron. Lett. 5 (1969) 677.
- (50) D. VANDORPE
Thèse Ingénieur-Docteur, Faculté des Sciences de Grenoble (1969).
- (51) D. VANDORPE
Etude mathématique d'un transistor bipolaire polarisé en continu,
Onde Electrique, 49 (1969) 717
- (52) D. VANDORPE
Etude bidimensionnelle du transistor M.O.S.
Onde Electrique, avril 1971.
- (53) D. VANDORPE, R. FUNCK
Etude d'une jonction PN polarisée en continu
Onde Electrique, 49 (1969) 49.
- (54) D. VANDORPE, N.H. XUONG
Modèle bidimensionnel de dispositifs semi-conducteurs, effets d'avalanche,
Ann. du Colloque intern. de Microélectronique avancée,
Chiron, Paris (1970).
- (55) D. VANDORPE, N.H. XUONG
Mathematical 2-dimensional model of semiconductor devices
Electron. Lett. 7 (1971) 47.
- (56) R. VARGA
Matrix iterative analysis
Prentice-Hall (1962).
- (57) N.H. XUONG
Thèse 3ème Cycle, Faculté des Sciences de Grenoble (1969).

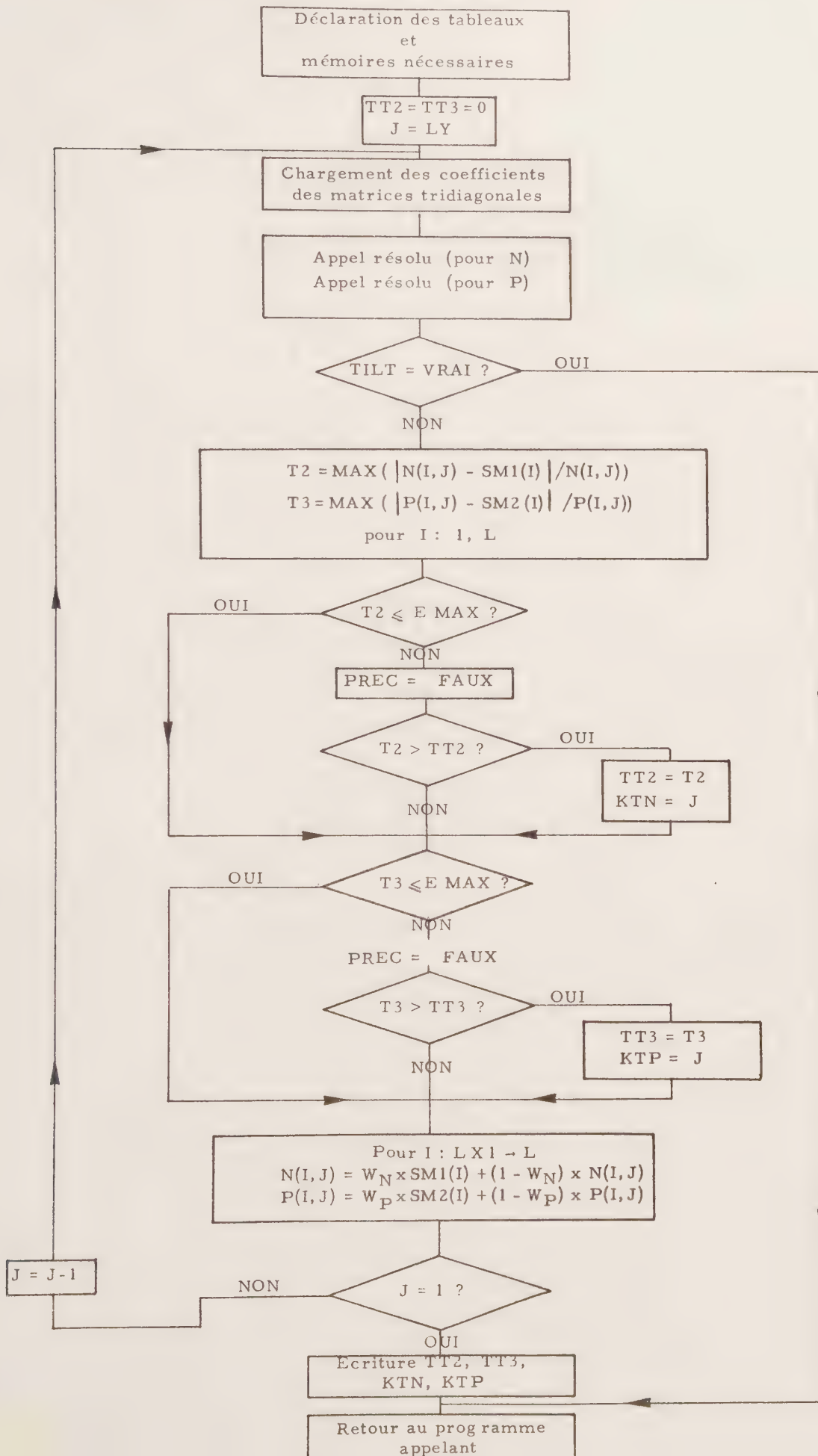
PROGRAMME MODMAG (Méthode locale)



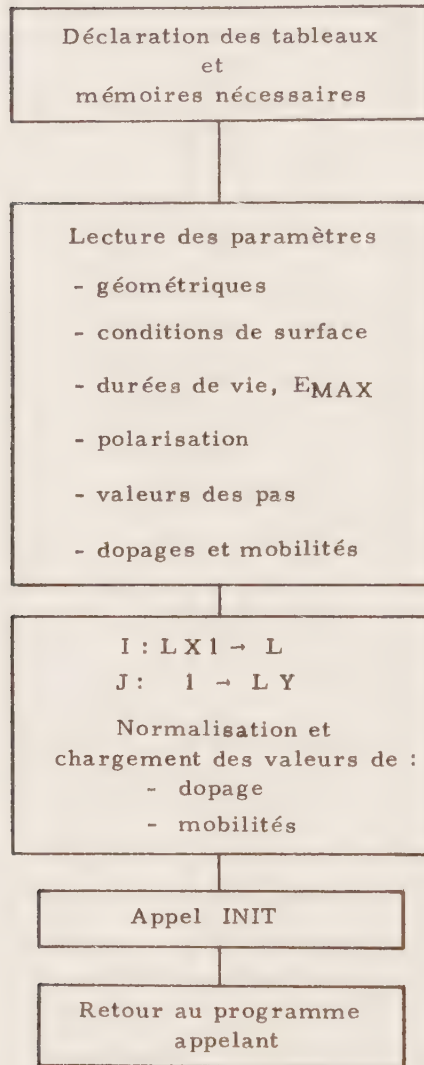
SOUS-PROGRAMME CHÂR2
(Méthode locale - Résolution par L.S.O.R.)



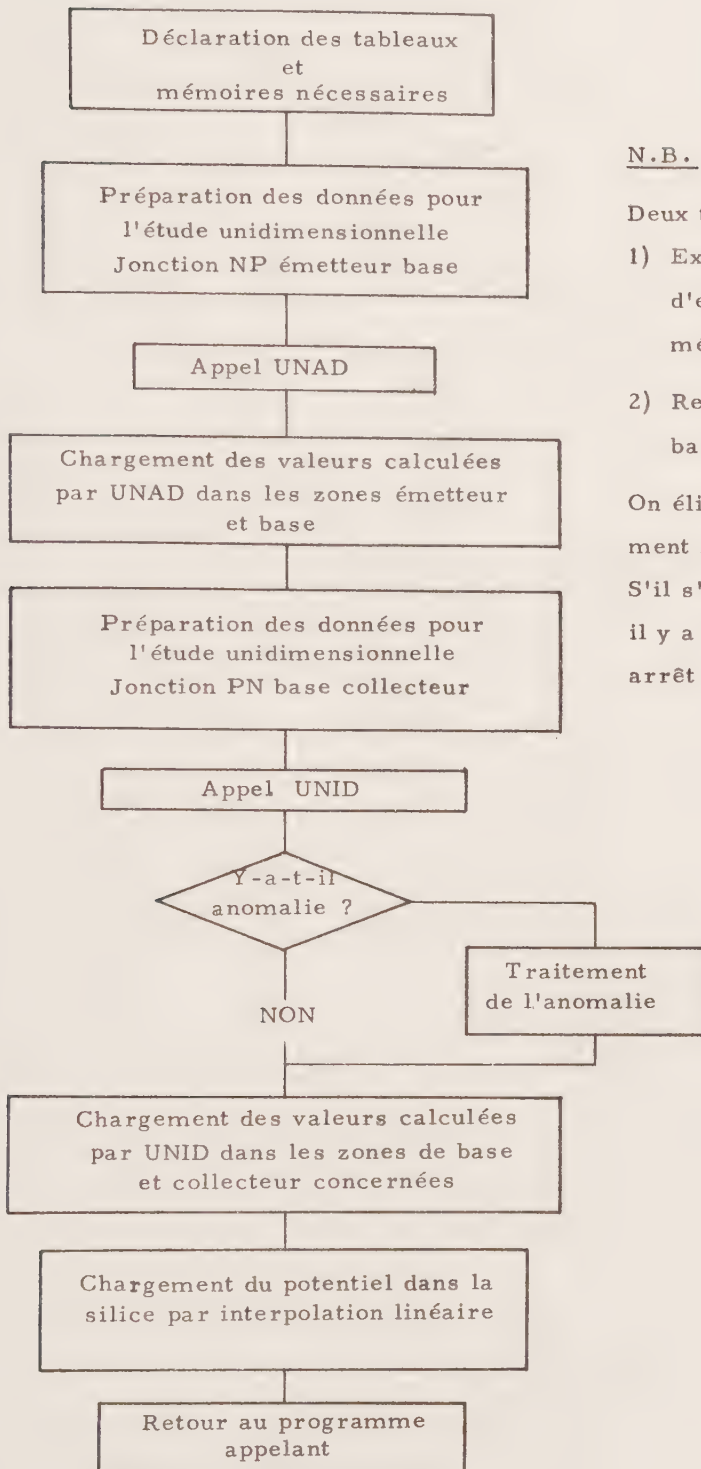
SOUS-PROGRAMME QNP (Méthode locale - Résolution par L.S.O.R.)



SOUS-PROGRAMME ENTRT



SOUS-PROGRAMME INIT
(Transistor bipolaire NPN)



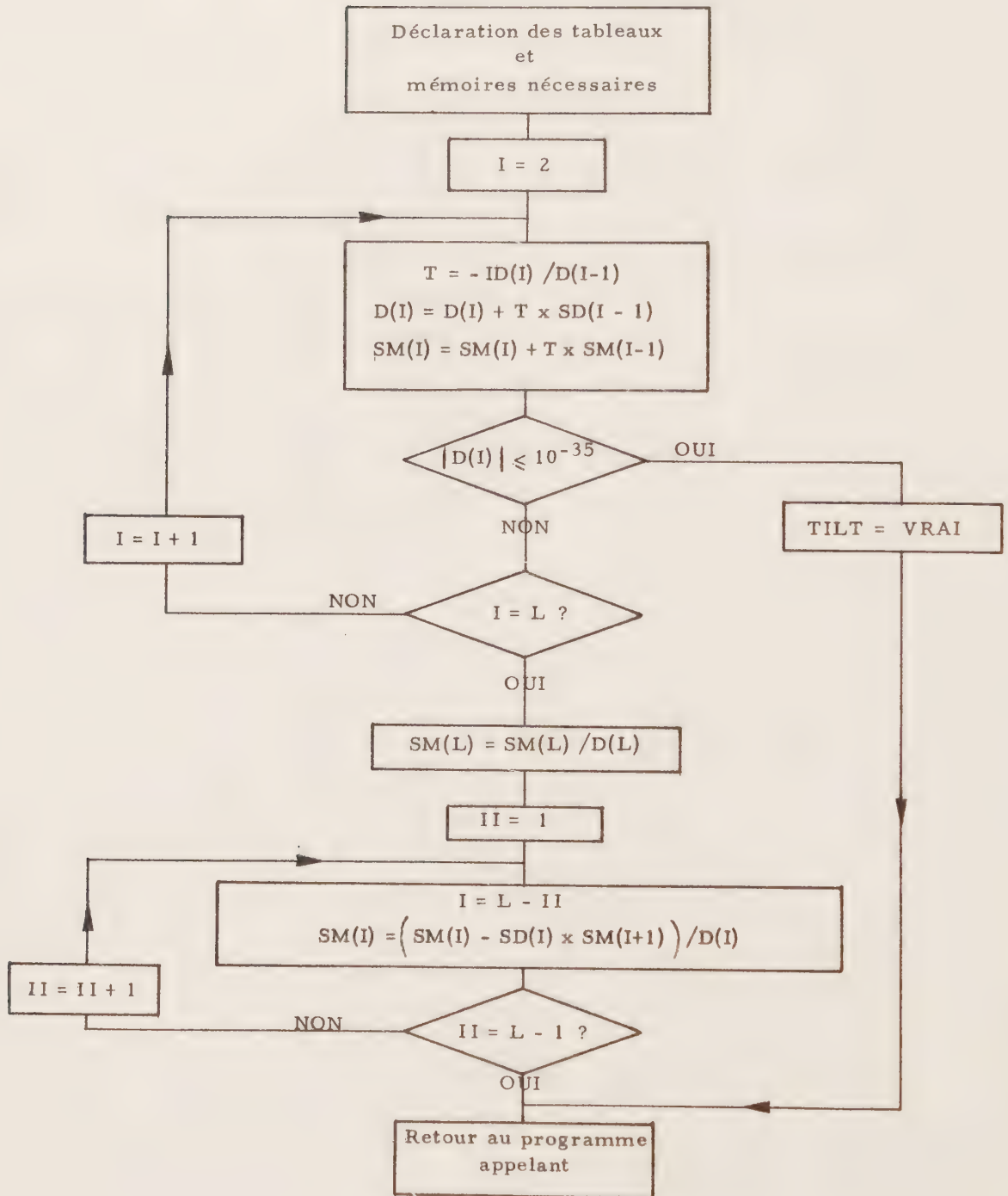
N.B.

Deux types d'anomalies peuvent se produire :

- 1) Extension trop grande d'une zone de charge d'espace qui se propage jusqu'à un contact métallique;
- 2) Recouvrement des zones de charge d'espace base émetteur et base collecteur.

On élimine ces anomalies en modifiant légèrement les résultats du calcul unidimensionnel. S'il s'avère impossible de faire ce traitement, il y a impression d'un message d'erreur et arrêt du traitement.

SOUS-PROGRAMME RESOLU



N.B. Dans ce sous-programme, les tableaux ont la signification suivante :

D : Diagonale principale	}	de la matrice tridiagonale étudiée
ID : Infer-diagonale		
SD : Super-diagonale		

SM : Second membre du système d'équations

Le résultat est rangé dans le tableau SM.

SOUS-PROGRAMME EDIT 2

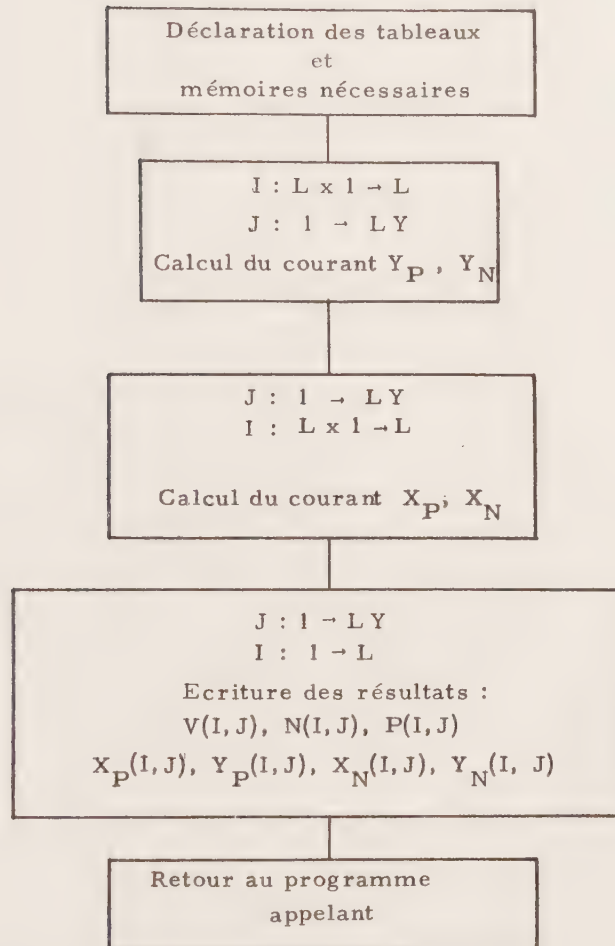


TABLE DES MATIERES

	Pages
INTRODUCTION	1
 <u>CHAPITRE I - EQUATIONS DE CIRCULATION DES PORTEURS</u>	 5
I.1 - Système d'équations	5
I.2 - Généralités - Justification de la méthode proposée	5
I.3 - Normalisation du système	6
I.4 - Existence et unicité de la solution	7
I.4.1 Système d'équations	7
I.4.2 Domaine d'intégration et conditions aux limites	8
I.4.3 Problème en ψ	10
I.4.4 Problème en λ et μ	13
I.4.5 Solution du problème général	15
 <u>CHAPITRE II - TRAITEMENT NUMERIQUE</u>	 17
II.1 - Choix de la méthode numérique	17
II.2 - Rappels sur la méthode du point fixe	17
II.3 - Modèle unidimensionnel	18
II.3.1 Equations	18
II.3.2 Conditions aux limites	19
II.3.3 Intégration partielle	20
II.3.4 Calcul numérique	21
II.4 - Modèle bidimensionnel	21
II.4.1 Conditions aux limites	22
II.4.2 Conditions à l'interface Si-SiO ₂	24
II.4.3 Discrétisation - Calcul de λ et μ	24
II.4.4 Calcul de ψ	27
II.4.5 Méthodes de résolution des systèmes d'équations posés	29
II.4.6 Algorithmes	33
II.4.7 Calcul des courants	34
II.4.8 Programmes réalisés	38
 <u>CHAPITRE III - AMELIORATIONS DES PERFORMANCES DES PROGRAMMES</u>	 39
III.1 - Généralités sur les performances des programmes	39
III.2 - Choix de la solution initiale	39
III.2.1 Problème unidimensionnel	40
III.2.2 Problème bidimensionnel	42
III.3 - Contraintes sur le maillage	45
III.3.1 Erreurs prépondérantes	45
III.4 - Choix de la méthode de résolution	47
III.5 - Accélération possibles	48
III.5.1 Evaluation du coefficient de sur-relaxation	48
III.5.2 Evaluation du coefficient d'accélération de la méthode de Peaceman Rachford	50
III.5.3 Limitation du domaine de calcul	50

CHAPITRE IV - EXEMPLES DE RESULTATS	53
IV.1 - Présentation générale	53
IV.2 - Etude bidimensionnelle du transistor M.O.S.	53
IV.2.1 Fonctionnement général du transistor M.O.S.	53
IV.2.2 Etude en fonctionnement normal	56
IV.2.3 Etude en fonctionnement saturé	61
IV.2.4 Etude au voisinage de la source	69
IV.2.5 Etude du perçage	69
IV.3 - Etude bidimensionnelle du transistor bipolaire	73
IV.3.1 Etude du potentiel	73
IV.3.2 Injection latérale et modulation de l'épaisseur de base	74
IV.3.3 Etude de la charge stockée	81
IV.3.4 Autres effets	82
CHAPITRE V - SIMULATION DE LA FABRICATION DES DISPOSITIFS	83
V.1 - Généralités	83
V.2 - Difficulté des mesures	83
V.3 - Système d'équations	84
V.3.1 Influence du champ électrique	84
V.3.2 Coefficients de diffusion	86
V.4 - Conditions aux limites	86
V.4.1 Modèle unidimensionnel	87
V.4.2 Modèle bidimensionnel	88
V.5 - Etude du problème mathématique	89
V.5.1 Etude du cas simplifié	90
V.6 - Méthodes numériques	90
V.6.1 Résolution des systèmes	91
V.6.2 Algorithme et programmes	92
V.6.3 Choix de la méthode numérique - accélération	93
V.6.4 Problèmes de l'interface	93
V.7 - Résultats obtenus	94
CONCLUSION	101
BIBLIOGRAPHIE	103
APPENDICE	107

Vu,
les Membres du Jury

MM. SARAZIN
KUNTZMANN
NEEL
ROBERT

Vu et approuvé,
le Directeur de l'U. E. R.
de Physique Nucléaire

A. SARAZIN

Vu et accordé le permis d'imprimer
Lyon, le 12 mai 1971

le Président de l'Université Claude Bernard de Lyon

J. BOIDIN

